Struktur und absolute Konfiguration einiger Pilzfarbstoffe

Inaugural - Dissertation

zur Erlangung der Doktorwürde
des Fachbereichs Chemie
der Freien Universität Berlin

vorgelegt von

Hans-Jürgen Hecht

aus Clausthal-Zellerfeld

1976

Struktur und absolute Konfiguration einiger Pilzfarbstoffe

Inaugural - Dissertation

zur Erlangung der Doktorwürde
des Fachbereichs Chemie
der Freien Universität Berlin

vorgelegt von

Hans - Jürgen Hecht

aus Clausthal - Zellerfeld

UNIV.
LEIDEN
BIBL.

1. Gutachter : Prof. Dr. H. Bradaczek

2. Gutachter : Prof. Dr. W. Steglich

Tag der mündlichen Prüfung : 27. 10. 1976

INHALTSVERZEICHNIS

		Seite
1.	Einleitung	1
2.	Theoretische Grundlagen der Röntgenbeugung	3
2.1	Theoretische Grundlagen der Phasenbestimmung mit statistischen Methoden	10
2.1.1	Algebraischen Betrachtung	10
2.1.2	Statistische Betrachtung	12
3.	Theoretische Grundlagen der Bestimmung der absoluten Konfiguration	16
4.	Experimentelle Durchführung	18
4.1	Messungen am lochstreifengesteuerten AED	18
4.2	Messungen am rechnergesteuerten AED	19
5.	Modellrechnungen	22
6.	Die Struktur der Vulpinsäure	25
6.1	Strukturbestimmung	25
6.1.1	Diskussion	26
6.2	Modellrechnungen an der Vulpinsäure	30
7.	Die Strukturen des Tridentochinons und Secotridentochinons	36
7.1	Strukturbestimmung des Tridentochinons	36
7.2	Strukturbestimmung des Secotridentochinons	37
7.3	Diskussion	39
7.4	Bestimmung der absoluten Konfiguration	48
8.	Zusammenfassung	55
A 1	Liste des Fortran Programms LAT	56
A 2	Liste des Fortran Programms AEDTES	68
	Liste des Fortran Programms AEDS	74
A 3	Liste des Fortran Programms MPOT	82
A 4	Liste des Fortran Programms BIJVOET	93
B 1	Atomparameterliste der Vulpinsäure	95
B 2	Beobachtete und berechnete Strukurfaktoren der Vulpinsäure	97

B 3 Atomparameterliste des Tridentochinons 122
B 4 Beobachtete und berechnete Struktur-
faktoren des Tridentochinons 126
B 5 Atomparameterliste des Secotridento-
chinons 161
B 6 Beobachtete und berechnete Struktur-
faktoren des Secotridentochinons 166
B 7 Liste der Bijvoet-Reflexe des
Tridentochinons 196
B 8 Liste der Bijvoet-Reflexe des
Secotridentochinons 199
Literaturverzeichnis 201

1. Einleitung

Höhere Pilze zeichnen sich häufig durch auffällige Färbungen und Farbreaktionen aus. Durch systematische Untersuchungen der hierfür verantwortlichen Pilzinhaltstoffe ist in letzter Zeit versucht worden, über die Beschreibung der Farbe hinaus konkrete Anhaltspunkte zur Klassifizierung der Pilze zu erhalten. Unter den bisher isolierten Substanzen befinden sich einige, die einen für natürlich vorkommende Verbindungen ungewöhnlichen Aufbau zeigen [1].
Mit chemischen Untersuchungsmethoden ist besonders in diesen Fällen eine eindeutige und vollständige Charakterisierung der Moleküle nicht immer möglich. Speziell die Konformation und, sofern es sich um chirale Verbindungen handelt, absolute Konfiguration der Moleküle ist in der Regel mit chemischen Methoden nicht direkt bestimmbar. Beide Problemstellungen sind mit Hilfe der Röntgenstukturanalyse zugänglich, seit in den letzten Jahren auf Grund verbesserter Meßmethoden die Bestimmung der absoluten Konfiguration auch bei Molekülen mit sehr geringer anomaler Dispersion möglich geworden ist. [30]

Der Farbstoff des Rostroten Lärchenrohrlings (suillus Iridentinus), Tridentochinon genannt, zeigte nach den Untersuchungen von Steglich et. al. [26] chemisch enge Verwandtschaft zu den in der Natur weit verbreiteten Ubichinonen. Als Struktur wurde für Tridentochinon die für natürlich vorkommende Substanzen ungewöhnliche Form einer Ansaverbindung vorgeschlagen. Die Sicherung dieses Strukturvorschlages, Bestimmung der Konformation und absoluten Konfiguration des Moleküls erschien nur mit röntgenographischen Methoden möglich. Allerdings war auf Grund der nur sehr geringen anomalen Dispersion der Sauerstoffatome der Verbindung zu erwarten, daß die

absolute Konfiguration nicht vollständig sicher festzustellen sein würde. Zur Überprüfung der Ergebnisse sollte daher die Strukturanalyse eines Derivats des Tridentochinons mit bekannter relativer Konfiguration dienen. Da ein Schweratomderivat mit höherer anomaler Dispersion nicht zur Verfügung stand, wurde hierzu das durch Ätherspaltung aus Tridentochinon gewonnene Secotridentochinon [26] verwendet.

Farbstoffe vom Pulvinsäuretyp sind bei Pilzen und Flechten weit verbreitet [1], [31]. Der Chemismus einiger Farbreaktionen der Verbindungen dieser Gruppe ist in den letzten Jahren geklärt worden [1], die Konformation der Moleküle blieb jedoch unsicher. Die Strukturanalyse der Vulpinsäure sollte für ein typisches Molekül der Substanzklasse die Konformation feststellen und damit Anhaltspunkte zum besseren Verständnis der intramolekularen sterischen Wechselwirkungen bei Verbindungen dieser Gruppe liefern.

2. Theoretische Grundlagen der Strukturanalyse durch Röntgenbeugung

Zur Beschreibung der Röntgenbeugung an Kristallen dient in der Beugungstheorie die Näherung nach Fraunhofer [6]. Der experimentelle Aufbau ist in Abb. 1 schematisch wiedergegeben.

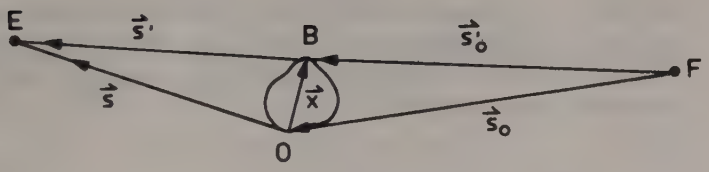


Abb. 1: Schematischer Aufbau des Beugungsexperimentes

Ein Objekt mit der Elektronendichteverteilung $\rho(\vec{x})$ wird von einem Fokus F aus in Richtung $\vec{s}_o$ mit monochromatischer Strahlung der Wellenlänge λ bestrahlt. Die Intensität I der in Richtung $\vec{s}$ gebeugten Strahlung wird im Punkt E registriert. Ihr Wert ist proportional zum Quadrat des Betrages der Amplitude der gestreuten Welle. Die Amplitude der im Ursprung O eines Koordinatensystems einteffenden Welle sei mit A_o bezeichnet. Im Punkt B ist die Amplitude $A(\vec{s}_o')$ einer einfallenden Welle dann durch

$$A(\vec{s}_o') = A_o \exp\left[\frac{2\pi i}{\lambda} |\vec{s}_o'|\right] \qquad (1)$$

gegeben. Die von B ausgehende Welle besitzt im Punkt E

die Amplitude

$$A(\vec{s}_o', \vec{s}', \vec{x}) = A_o \cdot \rho(\vec{x}) \cdot \exp\left[\frac{2\pi i}{\lambda}(|\vec{s}_o'| + |\vec{s}_o'|)\right] \quad (2)$$

Durch Integration über das streuende Volumen kann hieraus die im Punkt E resultierende Amplitude der am gesamten Objekt gebeugten Welle erhalten werden. Zur Berechnung des Integrals in der Näherung nach Fraunhofer muß dabei

$$\vec{x} << \vec{s}_o \quad \text{und} \quad \vec{x} << \vec{s}$$

gelten, d. h. die Ausdehnung des Objektes muß klein sein gegen die Entfernungen zum Fokus F und Detektor E. Diese Bedingung ist bei der Einkristallstrukturanalyse hinreichend genau eingehalten.

Mit

$$|\vec{s}_o'| = \sqrt{s_o^2 + 2\vec{s}_o\vec{x} + x^2} \quad (3)$$

und

$$|\vec{s}'| = \sqrt{s^2 - 2\vec{s}\vec{x} + x^2} \quad (3a)$$

folgt aus (3), (3a) nach Vernachlässigung der Terme mit x^2 und Reihenentwicklung unter Abbruch nach dem ersten Glied:

$$|\vec{s}_o'| = |\vec{s}_o| + \frac{\vec{x}\cdot\vec{s}_o}{|\vec{s}_o|} \quad ; \qquad |\vec{s}'| = |\vec{s}| - \frac{\vec{x}\cdot\vec{s}}{|\vec{s}|} \quad (3b)$$

Für die resultierende Amplitude im Punkt E wird aus (2) mit (3b)

$$A(\vec{e}_o, \vec{e}) = A_o \exp\left[\frac{2\pi i}{\lambda}(|s_o| + |s|)\right] \cdot \int_{V_x} \rho(x) \exp\left[\frac{2\pi i}{\lambda}(\vec{x}(\vec{e}_o - \vec{e}))\right] dv_x \quad (4)$$

erhalten,

wobei $\vec{e}_o = \frac{\vec{s}_o}{|\vec{s}_o|}$ und $\vec{e} = \frac{\vec{s}}{|\vec{s}|}$

Einheitsvektoren in Richtung der einfallenden und gebeugten Strahlung sind.
Die Terme vor dem Integral in (4) sind unabhängig vom beugenden Objekt und bei fester experimenteller Anordnung konstant. Als Strukturamplitude $F(\vec{h})$ des Objektes wird daher

$$F(\vec{h}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(\vec{x}) \exp\left[2\pi i \vec{h}\vec{x}\right] dv_x \qquad (5)$$

bezeichnet. (5) stellt ein dreidimensionales Fourierintegral dar, der Vektor $\vec{h}$ ist durch

$$\vec{h} = \frac{1}{\lambda} (\vec{e}_o - \vec{e}) \qquad (5a)$$

festgesetzt. Der durch $\vec{h}$ definierte Fourierraum wird auch reziproker Raum genannt, da er in einigen Eigenschaften reziprokes Verhalten zum physikalischen Raum, in dem $\vec{x}$ definiert ist, zeigt. Durch inverse Fouriertransformation wird aus $F(\vec{h})$ nach

$$\rho(\vec{x}) = \int_{-\infty}^{+\infty} F(\vec{h}) \exp\left[-2\pi i \vec{h}\vec{x}\right] dv_h \qquad (5b)$$

wieder die Elektronendichteverteilung $\rho(\vec{x})$ des Objektes erhalten. Die Strukturamplitude ist im allgemeinen eine komplexwertige Funktion, aus (5) läßt sich jedoch mit Hilfe der Euler'schen Formel für komplexe Zahlen herleiten, daß bei zentrosymmetrischen $\rho(\vec{x})$ nur relle Werte für $F(\vec{h})$ auftreten.
Im Kristallgitter ist die Elektronendichte $\rho_\infty(\vec{x})$ aufgebaut durch dreidimensional periodische Wiederholung der Elektronendichte $\rho_o(\vec{x})$ einer Gitterzelle. Die Identitätsperioden im Gitter sind durch Vektoren $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$, $\vec{a}_3$ gekennzeichnet, deren Spatprodukt das Volumen der Gitterzelle

ergibt. Die Ortsvektoren $\vec{x}_r$ der Gitterpunkte besitzen die Darstellung

$$\vec{x}_r = p_1 \vec{a}_1 + p_2 \vec{a}_2 + p_3 \vec{a}_3 ; \quad p_i \in \mathbb{Z}, \tag{6}$$

das Gitter läßt sich durch eine Gitterfunktion $z_{cr}(\vec{x})$ über eine Summe von Punktfunktionen mit

$$z_{cr}(\vec{x}) = \overline{Z}_{p_1} \overline{Z}_{p_2} \overline{Z}_{p_3} P(\vec{x} - p_1 \vec{a}_1 - p_2 \vec{a}_2 - p_3 \vec{a}_3) \tag{7}$$

beschreiben [2]. Das Faltungsprodukt der Funktion $z_{cr}(\vec{x})$ mit $\rho_0(\vec{x})$ ergibt dann die resultierende Elektronendichte $\rho_\infty(\vec{x})$ des Kristallgitters. Nach den Faltungstheorem der Fouriertransformation [2] ist damit die Strukturamplitude bei Beugung am Kristallgitter gleich dem Produkt der Fouriertransformierten von $\rho_0(\vec{x})$ und $z_{er}(\vec{x})$. Durch Fouriertransformation der Gitterfunktion $z_{cr}(\vec{x})$ wird im reziproken Raum wiederum eine Gitterfunktion $Z_{cr}(\vec{h})$ [2] erhalten.

$$Z_{cr}(\vec{h}) = \overline{Z}_h \overline{Z}_k \overline{Z}_1 P(\vec{h} - h\vec{b}_1 - k\vec{b}_2 - 1\vec{b}_3) \quad h,k,1 \in \mathbb{Z} \tag{8}$$

Die Basisvektoren $\vec{b}_i$ dieses reziproken Gitters sind über die Beziehung

$$\vec{a}_i \vec{b}_j = \delta_{ij} ; \quad i,j = 1,3 \tag{9}$$

definiert und verhalten sich somit reziprok zu den Basisvektoren $\vec{a}_i$ des physikalischen Gitters. Die Bildung des Produkts von (8) mit der Fouriertransformierten der Elektronendichte $\rho_0(\vec{x})$ nach (5) führt zur Bedingung, daß die Vektoren $\vec{h}$ in (5), (5a) reziproke Gittervektoren mit der Darstellung

$$\vec{h} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + 1\vec{b}_3 \quad h,k,1 \in \mathbb{Z} \tag{10}$$

sein müssen, und damit zum Auftreten diskreter Werte der Strukturamplitude bei Beugung an einem Kristallgitter. Die Elektronendichte $\rho_o(\vec{x})$ der Gitterzelle setzt sich aus den Elektronendichten der in der Zelle enthaltenen Atome zusammen und kann nach

$$\rho(\vec{x}) = \sum_j \rho(\vec{x}) \frown P(\vec{x} - \vec{x}_j) \qquad (11)$$

über Faltungsprodukte der Dichteverteilungen $\rho_j(\vec{x})$ der isolierten Atome j mit Punktfunktionen $P(\vec{x})$ beschrieben werden, wobei $\vec{x}_j$ die Ortsvektoren der Atome j angeben.

Nach dem Verschiebungstheorem der Fouriertransformation folgt mit (11) für die Strukturamplitude bei Beugung am Kristallgitter

$$F(\vec{h}) = \sum_j f_j(\vec{h}) \exp\left[2\pi i \vec{h}\vec{x}_j\right] \qquad (12)$$

Als Atomformamplitude $f_j(\vec{h})$ wird die Fouriertransformierte der ρ_j nach (5) bezeichnet, der Vektor $\vec{h}$ muß die Bedingung (10) eines reziproken Gittervektors erfüllen.

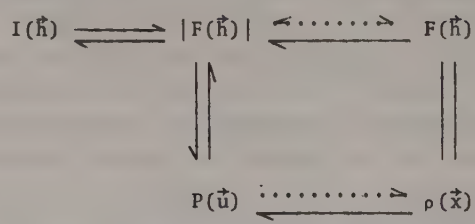
Als geometrische Interpretation der Gittervektoren $\vec{h}$ läßt sich mit Hilfe der Vektorrechnung herleiten, daß sie in physikalischem Raum Stellungsvektoren von Ebenen darstellen, deren Abschnitte auf den Achsen $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$, $\vec{a}_3$ des Koordinatensystems $\frac{1}{h}$, $\frac{1}{k}$, und $\frac{1}{l}$ sind[7]. Der Betrag der Gittervektoren $\vec{h}$ ist reziprok zum Abstand d_{hkl} dieser Flächen vom Koordinatenursprung nach

$$|\vec{h}| = \frac{n}{d_{hkl}}$$

wobei n der größte gemeinsame Faktor der Miller - Indices h,k,l der Ebene ist.
Aus der Definition (5a) des reziproken Vektors $\vec{h}$ kann für den Betrag von $\vec{h}$

$$|\vec{h}| = \frac{2 \sin \vartheta}{\lambda} \qquad (14)$$

hergeleitet werden, wenn ϑ der halbe Beugungswinkel zwischen einfallendem Strahl $\vec{e}_o$ und ausfallendem $\vec{e}$ ist. (13) und (14) zusammen ergeben das Beugungsgesetz nach Bragg. Aus (14) folgt, daß bei fester Wellenlänge λ nur Reflexe beobachtet werden können, deren reziproker Gittervektor $\vec{h}$ innerhalb der Ewald'schen Lagekugel mit Radius $\frac{2}{\lambda}$ um den Ursprung des reziproken Gitters liegt. Die Zusammenhänge zwischen den einer Messung zugänglichen Intensitäten $I(\vec{h})$ dieser Reflexe und der gesuchten Elektronendichteverteilung $\rho(\vec{x})$ lassen sich an Hand eines Diagramms [2] darstellen.



Die Beträge der Strukturamplituden sind aus den gemessenen Intensitäten direkt zugänglich.
Die Pattersonfunktion $P(\vec{u})$ ist das Faltungsquadrat der Elektronendichteverteilung. Nach dem Faltungstheorem gilt unter Ausnutzung der Symmetrieeigenschaft

$$F^*(\vec{h}) = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(-\vec{x}) \exp\left[+ 2\pi i \vec{h}\vec{x}\right] dv_x \qquad (15)$$

für die Pattersonfunktion

$$P(\vec{u}) = \rho(\vec{x}) \frown \rho(-\vec{x}) = \rho(\vec{x})^{\sim 2} = \int_{-\infty}^{\infty} F(\vec{h}) \cdot F^*(+h) \exp \left[-2\pi i \vec{h}\vec{u}\right] dv_u \qquad (16)$$

Sie ist daher durch Fourierinverstransformation aus den Meßwerten berechenbar. Es ist jedoch nur in Sonderfällen möglich, aus der Pattersonfunktion Rückschlüsse auf die Elektronendichteverteilung zu ziehen.
Strukturamplituden und Elektronendichte sind nach (5) und (5b) durch Fouriertransformation verbunden. Bei bekannten Atomlagen dient (12) zur Berechnung von $F(\vec{h})$.
Zur Berücksichtigung der thermischen Schwingungen der Atome wird jedoch ein Term T_j eingeführt gemäß

$$F(\vec{h}) = \sum_j f_j(\vec{h}) T_j \exp\left[2\pi i \vec{h}\vec{x}_j\right] \qquad (17).$$

Bei isotropen Schwingungen hat T_j die Form

$$T_j = \exp\left[-2\pi^2 U \left(\frac{2 \sin\vartheta}{\lambda}\right)^2\right], \qquad (18)$$

bei anisotropen

$$T_j = \exp\left[-2\pi^2 (U_{11}h^2b_1^2 + U_{22}k^2b_2^2 + U_{33}l^2b_3^2 + 2U_{12}hkb_1b_2 + 2U_{13}hlb_1b_3 + 2U_{23}klb_2b_3)\right] \qquad (18a)$$

U wird als isotroper, der Tensor (U_{ij}) als anisotroper Temperaturfaktor bezeichnet.
Eine direkte Berechnung der Strukturamplituden aus den Meßwerten ist nicht möglich, da aus den Intensitäten zwar die Beträge $|F(\vec{h})|$ zugänglich sind, nicht jedoch die nach

$$F(\vec{h}) = |F(\vec{h})| \cdot \exp\left[i\varphi(\vec{h})\right] \qquad (19)$$

benötigten Phasenwinkel $\varphi(\vec{h})$.
Die Ermittelung der Phasen stellt das grundlegende Problem der Einkristallstrukturanalyse dar. Zur Lösung dieses Problems dienen verschiedene Verfahren, die im wesentlichen entweder auf einer Auswertung der Pattersonfunktion beruhen oder Phasen über statistische Betrachtungen ermitteln.

Da im folgenden nur statistische Verfahren angewendet wurden, sei nur auf die theoretischen Grundlagen dieser Methoden eingegangen.

2.1. Theoretische Grundlagen der Phasenbestimmung mit statistischen Methoden.

Zur Festlegung des Koordinatenursprungs im direkten Gitter sind im allgemeinen die Phasen mehrerer Reflexe frei wählbar. Diese Werte können zu Ermittelung weiterer Phasen dienen, sofern Beziehungen zwischen Strukturamplituden bekannt sind. Die Herleitung dieser Zusammenhänge zwischen Strukturamplituden kann über algebraische und statistische Betrachtungen durchgeführt werden.

2.1.1. Algebraische Betrachtung

Als Grundlage zur Herleitung dient nach Sayre [4] der Zusammenhang zwischen Elektronendichte $\rho(\vec{x})$ und quadrierter Elektronendichte $\rho^2(\vec{x})$.
Bei Annahme eines schwarz - weiß Modells für $\rho(\vec{x})$ gilt

$$\rho(\vec{x}) = \rho^2(\vec{x}) \qquad (22)$$

Unterschiedliche Atomarten können in diesem Modell durch verschiedene Ausdehnung der "weißen" oder "schwarzen" Gebiete symbolisiert werden.
Durch Fouriertransformation folgt aus (22) unter Anwendung des Faltungstheorems

$$F(\vec{h}) = \int_{-\infty}^{\infty} F(\vec{h}) \cdot F(\vec{h} - \vec{k}) dv_k = F(\vec{h}) \frown F(\vec{h}) \qquad (23)$$

Da die Strukturamplituden nach (11) nur an diskreten Punkten, den reziproken Gitterpunkten, von Null verschieden sind, ist in (23) der Übergang auf eine Summenschreibweise möglich.

$$F(\vec{h}) = \sum_{\vec{k}} F(\vec{k})\, F(\vec{h} - \vec{k}) \qquad \vec{k} \in (-\infty, +\infty) \tag{24}$$

Bei centrosymmetrischen Strukturen ist mit (24) direkt eine Beziehung zur Ermittlung der Phasen gegeben, da hier nur die Vorzeichen der reellwertigen Strukturamplituden bestimmt werden müssen.
Für acentrische Strukturen liefert eine Zerlegung von (24) in Real- und Imaginärteil unter Anwendung der Euler'schen Formel für Komplexe Zahlen.

$$\operatorname{tg}\varphi(\vec{h}) = \frac{\sum_{\vec{k}} |F(\vec{k})|\, |F(\vec{h} - \vec{k})| \sin(\varphi(\vec{k}) + \varphi(\vec{h} - \vec{k}))}{\sum_{\vec{k}} |F(\vec{k})|\, |F(\vec{h} - \vec{k})| \cos(\varphi(\vec{k}) + \varphi(\vec{h} - \vec{k}))} \qquad \vec{k} \in (-\infty, +\infty) \tag{25}$$

(25) ermöglicht auch für acentrische Strukturen ausgehend von bekannten Phasen die Ermittlung zusätzlicher Werte.
Bei der algebraischen Herleitung der Σ_2 Beziehung (24) und Tangensformel (25) wird jeweils eine Summation über alle Vektoren $\vec{k}$ erhalten. Im Allgemeinen ist diese Summation jedoch nicht vollständig durchführbar, da nur ein begrenzter Satz von Phasen bekannt ist oder zur Festlegung des Koordinatenursprungs definiert werden kann. Aussagen über die Gültigkeit von (24) und (25) bei Summation über eine beschränkte Anzahl von Reflexen können über statistische Betrachtungen erhalten werden.

2.1.2. Statistische Betrachtung

Grundlage der Wahrscheinlichkeitsbetrachtungen ist die Herleitung eines Erwartungswertes für eine Strukturamplitude. Hierzu wird üblicherweise zunächst eine quasi - normierte Strukturamplitude, der E - Wert, [3,3a] mit

$$E(\vec{h}) = \frac{1}{\sqrt{\sigma_2}} \sum_j z_j \exp\left[2\pi i \vec{h}\vec{x}_j\right] \qquad (26)$$

definiert.
Die Summation in (26) erstreckt sich über alle Atome $_j$ der Zelle mit Ortsvektoren $\vec{x}_j$ und Ordnungszahlen z_j, mit σ_i ist

$$\sigma_i = \sum_j z_j^i \qquad \text{bezeichnet.}$$

Der mittlere Beitrag eines Atoms zu einem festen E - Wert $E(\vec{h})$ läßt sich [5], [8] bestimmen zu

$$\overline{\exp\left[2\pi i \vec{h}\vec{x}_j\right]}^h = \frac{z_j}{\sigma_2^{1/2}} E(\vec{h}) \qquad (27)$$

wie durch Umformung und Summation leicht verifizierbar.
Damit gilt für den Mittelwert über $\vec{k}$ einer Strukturamplitude $E(\vec{h} + \vec{k})$ mit

$$\overline{E(\vec{h} + \vec{k})}^k = \frac{1}{\sqrt{\sigma_2}} \sum_j z_j \exp\left[2\pi i \vec{h}\vec{x}_j\right] \overline{\exp\left[2\pi i \vec{k}\vec{x}_j\right]}^k \qquad (28)$$

nach Einsetzen von (27)

$$\overline{E(\vec{h} + \vec{k})}^k = \frac{1}{\sigma_2} \sum_j z_j^2 \exp\left[2\pi i \vec{h}\vec{x}_j\right] E(\vec{k}) \qquad (29)$$

Der Erwartungswert $\langle E_{sq}(\vec{h})\rangle$ des E - Wertes $E_{sq}(\vec{h})$ der quadrierten Struktur mit

$$E_{sq}(h) = \frac{1}{\sigma_2} \sum_j z_j^2 \exp\left[2\pi i \vec{h}\vec{x}_j\right] \qquad (30)$$

läßt sich ebenfalls durch Verwendung von (27) bestimmen zu

$$\langle E_{sq}(\vec{h})\rangle = \frac{\sigma_3}{\sigma_2^{3/2}} E(\vec{h}) \qquad (31)$$

Einsetzen von (31) in (29) und Transformation der Indices ergibt als Erwartungswert $\langle E(\vec{h})\rangle$ einer normierten Strukturamplitude $E(\vec{h})$.

$$\langle E(\vec{h})\rangle = \frac{\sigma_2}{\sigma_2^{3/2}} E(\vec{h} - \vec{k})\, E(\vec{k}) \qquad (32)$$

Sofern die Beiträge der Atome zu einer Strukturamplitude als unabhängige Zufallsvariable angesehen werden können, so ist für $E(\vec{h})$ eine Gauß - Verteilung um den Mittelwert (32) zu erwarten.
Bei zentrosymmetrischen Strukturen mit reellwertigen Strukturamplituden kann die Verteilungsfunktion direkt mit

$$P(E(\vec{h})) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(E(\vec{h}) - \frac{\sigma_3}{\sigma_2^{3/2}}\, E(\vec{h} - \vec{k})E(\vec{h})\right)^2\right] \qquad (33)$$

angegeben werden.
Sofern nur der Betrag des E - Wertes vorgegeben ist, tritt (33) in zwei möglichen Formen auf, zum einen mit einer Gauß - Verteilung P_+ von $|E(\vec{h})|$ um den Mittelwert (32) für $E(\vec{h})$ positiv, zum anderen mit einer Gauß - Verteilung P_- von $|E(\vec{h})|$ um den negativen Mittelwert (32) für $E(\vec{h})$ negativ.
Mit

$$P_+(E(\vec{h})) + P_-(E(\vec{h})) = 1 \qquad (34)$$

folgt aus (33) als Wahrscheinlichkeit für positives $E(\vec{h})$ nach Umformung:

$$P_+(E(\vec{h})) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\text{th}\left[\frac{\sigma_3}{\sigma_2^{3/2}}\,|E(\vec{h})\cdot E(\vec{h}-\vec{k})\cdot E(\vec{k})|\right] \qquad (35)$$

Nach (35) kann somit im zentrosymmetrischen Fall die Wahrscheinlichkeit $P_+(E(\vec{h}))$ berechnet werden, daß $E(\vec{h})$ in einer Σ_2 Beziehung (32) einen positiven Wert besitzt.

Bei azentrischen Strukturen kann gleichbedeutend mit einer Gauß - Verteilung von $E(\vec{h})$ um den Mittelwert (32) eine Gauß - Verteilung der reellen Größe

$$\Delta E^2(\vec{h}) = (E(\vec{h}) - \langle E(\vec{h})\rangle)^2 \qquad (36)$$

um Null angenommen werden.
Wird für kleine Werte von

$$\Delta\varphi(\vec{h}) = \varphi(\vec{h}) - \langle\varphi(\vec{h})\rangle \qquad (37)$$

der Kosinus gleich dem Winkel gesetzt, so folgt mit (36) und (32) die Proportionalität

$$P(\Delta E^2) \sim \exp\left[-\Delta E^2\right] \sim \exp\left[-\Delta\varphi\right] \sim P(\varphi(\vec{h})) \qquad (38)$$

Da

$$\int_0^{2\pi} P(\varphi(\vec{h}))\,d\varphi = 1 \qquad (39)$$

für eine normierte Verteilungsfunktion gelten muß, kann damit für die Verteilungsfunktion $P(\varphi(\vec{h}))$ der Phasenwinkel

$$P(\varphi(h)) = \frac{\exp\left[-\Delta E^2\right]}{\int_0^{2\pi}\exp\left[-\Delta E^2\right]d\varphi} \qquad (40)$$

angegeben werden.

Mit (36), (32) läßt sich (40) auf die Form

$$P(\varphi(\vec{h})) = \frac{\exp\left[\kappa \cos(\varphi(\vec{h}) - \varphi(\vec{h} - \vec{k}) - \varphi(\vec{k}))\right]}{2\pi\, I_0(\kappa)} \qquad (41)$$

bringen, wobei als Abkürzung

$$\kappa = |E(\vec{h})|\ |E(\vec{h} - \vec{k})|\ |E(\vec{k})| \cdot 2\,\frac{\sigma_3}{\sigma_2^{3/2}} \qquad (42)$$

gesetzt wurde und $I_0(\kappa)$ eine Besselfunktion ist [8], [10]. Sofern mehrere Tripelbeziehungen zwischen Reflexen nach (32) aufgestellt werden können, ist die resultierende Verteilungsfunktion der Phasen $\varphi(\vec{h})$ durch das Produkt der Funktionen nach (41) gegeben. Für den Maximalwert dieser resultierenden Verteilungsfunktion ist durch Differentiation und Eliminierung von Nullverschiedener Faktoren die Bedingung:

$$\sum_{\vec{k}} |E(\vec{h} - \vec{k})|\ |E\ \vec{k}|\ \sin(\varphi(\vec{h}) - \varphi(\vec{h} - \vec{k}) - \varphi(\vec{k})) = 0 \qquad (43)$$

herleitbar, wobei die Summation nur eine beschränkte Anzahl von Reflextripel (32) erfaßt. Umformung von (43) ergibt mit

$$\operatorname{tg}\varphi(\vec{h}) = \frac{\sum_{\vec{k}} |E(\vec{h} - \vec{k})|\ |E(\vec{k})|\ \sin(\varphi(\vec{h} - \vec{k}) + \varphi(\vec{k}))}{\sum_{\vec{k}} |E(\vec{h} - \vec{k})|\ |E(\vec{k})|\ \cos(\varphi(\vec{h} - \vec{k}) + \varphi(\vec{k}))} \qquad (44)$$

die Tangensformel für eine begrenzte Anzahl von Reflextripeln. Die Wahrscheinlichkeit einer Phase $\varphi(\vec{h})$ ist dann durch die entsprechende aus (41) resultierende Verteilungsfunktion gegeben. Die Tangensformel wurde auf anderem Wege erstmals von Karle und Hauptmann [9] hergeleitet.

3. Theoretische Grundlagen der Bestimmung der absoluten Konfiguration

Optisch aktive Verbindungen treten in zwei, sich wie Bild und Spiegelbild verhaltenden, enantiomeren Formen auf. Während in zentrosymmetrischen Raumgruppen beide Formen im Racemat vorhanden sein müssen, kann in azentrischen Raumgruppen, die keine Spiegelebenen enthalten, nur einer der Enantiomeren vorliegen. Eine Entscheidung, welche der beiden Formen im Kristallgitter vorhanden ist, kann jedoch mittels Röntgenstrukturanalyse nur unter besonderen Umständen getroffen werden.

Bei Annahme einer reellen Elektronendichte $\rho(\vec{x})$ gilt nach dem Gesetz von Friedel mit (7)

$$F^*(\vec{h}) = \sum_j f_j \exp\left[-2\pi i \vec{h}\vec{x}_j\right] = F(-\vec{h}) \qquad (45)$$

In diesm Fall ist ein Unterschied zwischen den Intensitäten $I(\vec{h})$ und $I(-\vec{h})$ der an Bild- und Spiegelbildmolekül gestreuter Strahlung nicht feststellbar, sofern Absorptionseinflüsse eliminiert sind.
Wenn die Wellenlänge λ der benutzten Strahlung in der Nähe der Absorptionskante einer Atomart der Verbindung liegt, muß jedoch anomale Dispersion berücksichtigt werden. Diese wird beschrieben durch Einführung einer komplexen Atomformamplitude für diese Atomsorte nach

$$f_j(\vec{h}) = f_j'(\vec{h}) + \Delta f_j' + \Delta f_j'' \qquad (46)$$

Aus (7) und (45) folgt damit unmittelbar bei anomaler Dispersion

$$F^*(\vec{h}) \neq F(-\vec{h})$$

So daß hier auch nach Berücksichtigung von Absorptions-

einflüssen Unterschiede in den Intensitäten $I(\vec{h})$ und $I(-\vec{h})$ auftreten.
Nach Bijvoet [11, 11a] kann daher bei Berücksichtigung der anomalen Dispersion durch Vergleich der gemessenen Intensitäten $I(\vec{h})$ und $I(-\vec{h})$ mit den für Streuung an Bild- und Spiegelbildmolekül berechneten Intensitäten zwischen beiden enantiomeren Formen unterschieden werden.

4. Experimentelle Durchführung

Die röntgenographischen Arbeiten an den drei Substanzen Tridentochinon, Secotridentochinon und Vulpinsäure wurden nach den üblichen Verfahren in zwei Schritten durchgeführt.
Zur Ermittelung von zunächst noch ungenauen Gitterkonstanten dienten Drehkristall- und Weissenbergaufnahmen. Durch Auswertung der Auslöschungen und Intensitätssymmetrien der Weissenbergaufnahmen ließen sich bei allen drei Verbindungen Kristallsystem und Raumgruppe eindeutig festlegen.
Nach diesen Vorarbeiten wurden alle weiteren Messungen auf einem Siemens Automatischen Einkristalldiffraktometer AED durchgeführt. Die Steuerung der Diffraktometer erfolgte bei den Messungen an der Vulpinsäure und einem Teil der Messungen des Secotridentochinons direkt durch einen PDP - 15 Rechner, bei allen übrigen Messungen über Lochstreifen.

4.1. Messungen am lochstreifengesteuerten AED

Die Durchführung von Arbeiten an einem Lochstreifengesteuerten AED ist bereits mehrfach ausführlich beschrieben worden [14], [32], [33]. Es seien daher hier nur die einzelnen Stadien der Messung angeführt. Zur Bestimmung genauer Gitterkonstanten wurde zunächst das Intensitätsprofil möglichst hoch indizierter Achsenreflexe in differentieller Abtastung aufgenommen. Die Auswertung der Streuwinkel Θ der Intensitätsmaxima nach der Bragg'schen Gleichung (13); (14) ergab die für die weiteren Messungen benutzten Werte der Gitterkonstanten. Standardabweichungen wurden aus der Streuung der Meßwerte abgeschätzt.

Zur anschließenden Messung der integralen Reflexintensitäten diente die Fünfwertmethode. Die Meßzeitermittelung erfolgte an Hand einer Punktmessung im berechneten Intensitätsmaximum jedes Reflexes, wobei als maximale Meßzeit pro Schritt 0.6 sec vorgewählt war.
Bei der Intensitätsmessung der Bijvoet Reflexe zur Bestimmung der absoluten Konfiguration wurde im Unterschied hierzu eine konstante Meßzeit von 12 sec pro Schritt gewählt.
Zur Berechnung des Steuerlochstreifens und Auswertung der Fünfwertmessung dienten die Programme ELDQ [12] und AEDALS [13].

4.2. Messungen am rechnergesteuerten AED

Die Stadien der Messungen sind hier analog zu den beim lochstreifengesteuerten AED. Die Steuerung und Auswertung der Messungen erfolgte hier jedoch direkt über einen PDP - 15 Rechner.
Zur Steuerung der Gitterkonstantenbestimmung wurde im Rahmen dieser Arbeit das Programm LAT entwickelt. Es berechnet aus den eingegebenen, noch ungenauen Gitterkonstanten die Eulerwinkel vorgewählter Reflexe und führt zunächst einen θ - 2θ Scan des Reflexprofils durch. Sofern die ϕ bzw. χ- Winkel eines Reflexes von Null verschieden sind, wird zusätzlich ein ϕ bzw. χ Scan bei festem Streuwinkel θ vorgenommen. Eine Berechnung der Schwerpunkte der Intensitätsprofile ergibt die beobachteten Eulerwinkel der Reflexe, aus denen korrigierte Werte für die Gitterkonstanten rückgerechnet werden.
Da das Verfahren die Auswertung von Achsen- und allgemeinen Reflexen ermöglichen sollte, mußte hierzu ein relativ aufwendiger Matrixformalismus benutzt werden.

Nach Englmeier [14] können die Gitterkonstanten aus den Eulerwinkeln dreier linear unabhängiger Reflexe nach

$$\mathbb{B} = (\mathbb{G} \cdot \mathbb{H}^{-1}) \tag{47}$$

berechnet werden.
Die Matrix $\mathbb{H}^{-1}$ ist dabei die Inverse der Matrix $\mathbb{H}$ der Miller Indices dieser Reflexe mit

$$\mathbb{H} = \begin{pmatrix} h_1 & h_2 & h_3 \\ k_1 & k_2 & k_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{pmatrix} \tag{48}$$

und die Elemente g_{ij} der Matrix $\mathbb{G}$ sind für einen Reflex mit reziproken Gittervektor $\vec{h}_j$ (12), (14) durch

$$\begin{aligned} g_{1j} &= |\vec{h}_j| \cos \chi_j \cos \phi_j \\ g_{2j} &= |\vec{h}_j| \cos \chi_j \sin \phi_j \\ g_{3j} &= |\vec{h}_j| \sin \chi_j \end{aligned} \tag{48}$$

gegeben.
Aus dem Produkt der Matrix $\mathbb{B}$ (47) mit der Transponiertem $\mathbb{B}'$ werden dann die Beträge b_i der reziproken Gittervektoren und die Winkel β_i zwischen den Vektoren entnommen nach

$$\mathbb{B}' \cdot \mathbb{B} = \begin{pmatrix} b_1^2 & b_1 b_2 \cos\beta_3 & b_1 b_3 \cos\beta_2 \\ b_1 b_2 \cos\beta_3 & b_2^2 & b_2 b_3 \cos\beta_1 \\ b_1 b_3 \cos\beta_2 & b_2 b_3 \cos\beta_1 & b_3^2 \end{pmatrix} \tag{49}$$

Die inverse Matrix hierzu enthält entsprechend die direkten Gitterkonstanten.
Eine Liste des Fortran Programms LAT ist im Anhang A1 zusammengestellt.

Zur Steuerung der Intensitätsmessung am AED 2 wurde das Programm AEDTES entwickelt. Dieses Programm erhält als Eingabe die Eulerwinkel der Reflexe von einem mit dem Programm ELDQ erstellten Plattenfile.
Die Meßzeit wird aus dem bei einen θ - 2θ Scan mit minimaler Meßzeit erhaltenen Intensitätswert so berechnet, daß bei einen zweiten θ - 2θ Scan eine vorgegebene Impulszahl erreicht wird. Hierbei wird allerdings eine maximale Meßzeit nicht überschritten. Die Bestimmung des Reflexuntergrundes erfolgt durch eine Punktmessung am Anfang und Ende des Scans in insgesamt der gleichen Meßzeit, die für die Reflexabtastung benutzt wird (3-Wert-Methode). Zur Kontrolle der Messung wird die Abweichung des Schwerpunktes der gemessenen Intensitätsverteilung vom theoretischen Intensitätsmaximum im Meßprotokoll ausgegeben. Außerdem erscheinen hier Fehlermeldungen bei asymmetrischem Reflexuntergrund und asymmetrischen Flanken der Intensitätsverteilung.

Zur Messung einzelner Bijvoetreflexe wurde dieses Programm so erweitert, daß aus den Eingabedaten der Gitterkonstanten und Reflexindices die Eulerwinkel direkt berechnet und für orthorhombische Kristallsysteme die Bijvoetreflexe nacheinander bestimmt werden. Die Meßzeit wurde in diesem Fall nach dem Kriterium berechnet, daß innerhalb einer maximalen Meßzeit der relative statistische Fehler der Intenstätsmessung kleiner als ein vorgegebener Wert werden sollte. Eine Liste des Fortranprogramms AEDTES und der modifizierten Version AEDS ist im Anhang A 2 gegeben.

5. Modellberechnungen

Zur Durchführung der Rechnungen wurde das Programm MPOT entwickelt. Es ermöglicht zunächst die Drehung von Atomen um vorwählbare Achsen, wobei Drehwinkel und Anzahl der Wiederholung der Drehung beliebig sind. Im Anschluß an jede Drehung werden intra- und wahlweise intermolekulare Abstände und über zwei unterschiedliche empirische Potentialansätze die Änderungen der potentieller Energie berechnet. Die benutzten Potentialansätze berücksichtigen nur van der Waals Kräfte und beruhen auf der nach Kitaigorodsky näherungsweise gültigen Annahme, daß diese Wechselwirkungen nur abhängig sind von der Art der betrachteten Atome und ihrem Abstand und sich additiv verhalten.
Nach Kitaigorodsky et. al. [15, 16] kann unter diesen Annahmen als universelles Potential V zur Beschreibung der Wechselwirkung nicht gebundener Atome der Ansatz

$$V_K(r) = 42000 \cdot \exp\left(-13.6 \cdot \frac{r}{r_0}\right) - 0.119 \cdot \left(\frac{r_0}{r}\right)^6 \qquad (50)$$

verwendet werden, wobei r_0 der Gleichgewichtsabstand zweier Atome und r ihr experimenteller Abstand ist. Die in [15] angegeben und in Tabelle 1 angeführten Werte der Gleichgewichtsabstände sind dabei so bestimmt, daß bei einem Atomabstand r gleich der Summe der van der Waalsradien das Potential nach (50) gleich Null wird.

Tab. 1 Gleichgewichtsabstände für das Universelle Potential nach Kitaigorodsky [15]

Wechselwirkung	r_0 (Å)
H - H	2.66
H - N	3.06
H - O	3.00

H - C	3.22
N - N	3.44
N - O	3.39
N - C	3.61
O - O	3.33
O - C	3.56
C - C	3.78

Während bei dem universellen Potential nur ein Parameter, der Gleichgewichtsabstand r_0, abhängig ist von der Art der wechselwirkenden Atome, geben Giglio et. al. [17] einen Potentialansatz, der vier hiervon abhängige Parameter enthält.
Die Parameter des Ansatzes

$$V_\theta(r) = \frac{A \exp(-Br)}{r^D} - \frac{C}{r^6} \qquad (51)$$

sind in Tabelle 5 zusammengestellt.

Tab. 5 Parameter der Potentialfunktion nach Giglio et. al. [17]

Wechselwirkung	10^{-3} A	B	C	D
H - H	6.6	4.08	49.2	0
H - C	44.8	2.04	125.0	6
H - N	52.1	2.04	132.0	6
H - O	42.0	2.04	132.7	6
C - C	301.2	0.00	327.2	12
C - N	340.0	0.00	340.0	12
C - O	278.7	0.00	342.3	12
N - N	387.0	0.00	354.0	12
N - O	316.2	0.00	356.0	12
O - O	259.0	0.00	358.5	12

Bei beiden Potentialansätzen sind nach [15, 16] und [17] die Parameter so bestimmt, daß bei Angabe der Abstände in Å die Energiewerte in der Dimension kcal erhalten werden. Eine Liste des Fortran-Programms MPOT ist im Anhang A 3 zusammengestellt.

6. Die Struktur der Vulpinsäure

6.1. Strukturbestimmung

Für die Messung wurde ein gelblicher plättchenförmiger Kristall der ungefähren Ausdehnung 0.6 x 0.4 x 0.05 mm benutzt. Die ermittelten Kristalldaten sind in Tabelle 3 zusammengestellt. Die Standardabweichungen sind jeweils in Klammern angegeben.

Tab. 3

Vulpinsäure $C_{19}H_{14}O_5$	M = 322 gr/Mol
Raumgruppe	monoklin
Gitterkonstanten	a = 7.821 (3) Å
	b = 7.866 (3) Å
	c = 26.589 (4) Å
	ß = 102.74 (1) °
Zellvolumen	1595 (1) $Å^3$
experimentelle Dichte	ρ_{ex} = 1.30 gr/cm^3
röntgenographische Dichte	$\rho_{rö}$ = 1.341 gr/cm^3
linearer Absorptionskoeffizient für Mo K_α Strahlung mit	μ = 1.056 cm^{-1}
	λ = 0.71069 Å

Es wurden 3204 Reflexe mit Streuwinkeln θ zwischen 2° und 26° vermessen.
Bei 879 Reflexe war der Wert der gemessenen Intensität kleiner als der doppelte statistische Fehler. Diese Reflexe wurden als unbeobachtet eingestuft und ihnen der Wert des statistischen Fehlers zugeordnet.
Für die Rechnungen zur Strukturbestimmung und anschließenden Verfeinerung wurden die Programme des X - RAY 72 [18] Systems benutzt. Die Lösung des Phasenproblems gelang mit direkten Methoden. Da die Raumgruppe zentrosymmetrisch war, diente hierzu Σ_2 Beziehungen nach (32).

Nach Bestimmung der Phasen von drei Reflexen zur Festlegung des Koordinatensystems wurden aus der Σ_2 Beziehung der Phasen von 393 weiteren Reflexen mit E - Werten größer 1.4 erhalten. Aus einer mit diesen Reflexen berechneten Fouriersynthese konnten die Ortsparameter aller Kohlenstoff- und Sauerstoffatome des Moleküls bestimmt werden. Die Atomparameter wurden nach dem least squares Verfahren verfeinert, wobei für Kohlenstoff und Sauerstoff anisotrope Temperaturfaktoren nach (18a) eingeführt wurden. Die Ortsparameter der Wasserstoffatome wurden aus Differenzfouriersynthesen bestimmt. Für die Wasserstoffatome wurden isotrope Temperaturfaktoren nach (18) benutzt.
Eine Absorptionskorrektur wurde auf Grund des geringen Absorptionskoeffizienten nicht vorgenommen. Nach Konvergenz der Verfeinerungen betrug der endgültige R - Wert 5.9 % mit

$$R = \frac{\Sigma_h \left| |F_{obs}(\vec{h})| - |F_c(\vec{h})| \right|}{\Sigma_h |F_{obs}(\vec{h})|}$$

Die erhaltenen Atomparameter sind in Tabelle B 1 zusammengestellt, in Tabelle B 2 die beobachteten und berechneten Strukturfaktoren gelistet.

6.1.1. Diskussion

Die Bindungslängen und Winkel sind in den Abbildungen 2 und 3 enthalten.
Der geringe Kontaktabstand von H 07 zu O 10 von 1.69 (4) Å zeigt eine recht kräftige intramolekulare Wasserstoffbrückenbindung an. Für den Abstand der beteiligten Sauerstoffatome werden nach Joesten und Schaad [19] bei starken Brückenbindungen Werte zwischen 2.7 Å und 2.4 Å

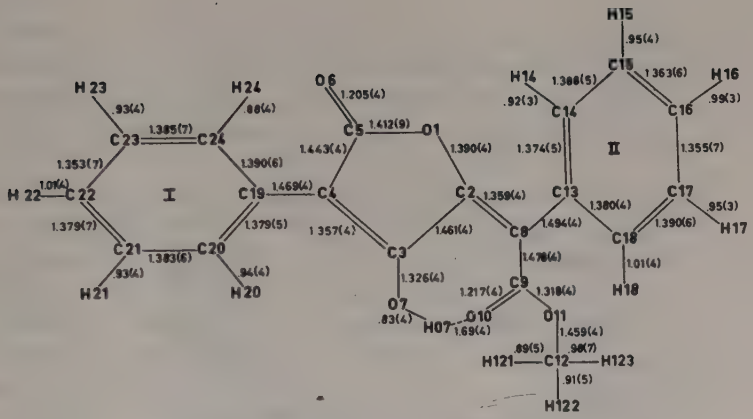


Abb. 2: Bindungslängen der Vulpinsäure

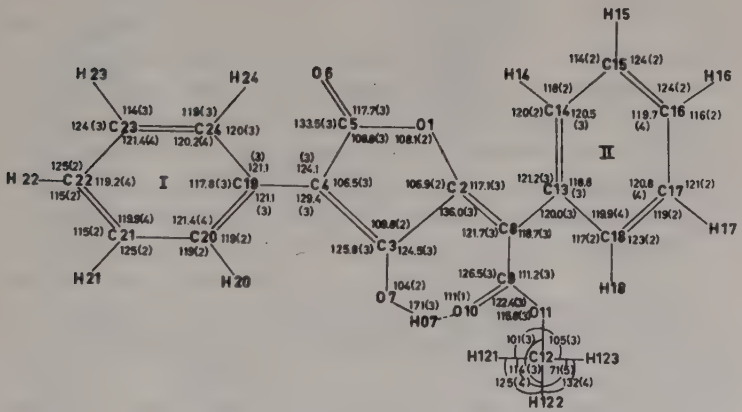


Abb. 3: Bindungswinkel der Vulpinsäure

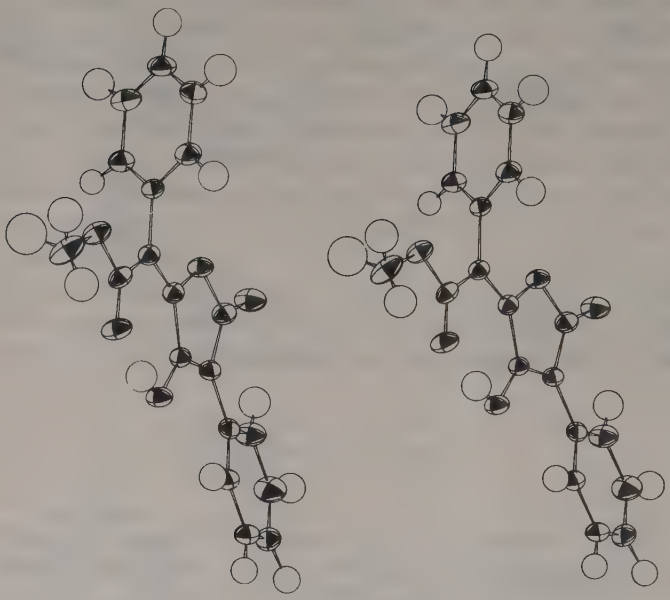


Abb. 4: Stereobildpaar des Moleküls der Vulpinsäure

erwartet. Der hier auftretende Abstand von O 7 zu O 10 ist mit 2.515 (4) Å hiermit in Übereinstimmung. Der Lactonring ist nahezu planar, die maximale Abweichung von der Ausgleichsebene durch die Atome dieser Gruppe tritt am Atom C 5 auf und beträgt 0.008 Å.
Ebenfalls liegt die Carboxylgruppe recht gut in dieser Ebene, wobei das Atom O 10 mit 0.12 Å die höchste Abweichung von der Ebene zeigt. Aus einem Vergleich der Bindungslängen mit Standardwerten [20] kann auf ein System konjugierter Doppelbindungen innerhalb dieser planaren Gruppe geschlossen werden. So sind die Bindungen C 8 - C 2 und C 3 - C 4 mit 1.359 (4) Å und 1.357 (4) Å gegenüber isolierten Doppelbindungen mit 1.337 (6) Å verlängert. Die Bindungen C 2 - C 3 und C 8 - C 9 zeigen mit 1.461 (4) Å und 1.478 (4) Å entsprechend geringere Werte, als den bei Einfachbindungen mit 1.53 Å bis 1.54 Å erwarteten Abstand. Hiermit und mit der Annahme einer Brückenbindung in Übereinstimmung ist auch die Bindung C 3 - O 7 auf 1.326 (4) Å verkürzt (partielle Doppelbindung: 1.36 (1) Å).
Die Phenylgruppen bilden unterschiedliche Anstellwinkel mit der Ebene der Lactongruppe. Die Ausgleichsebene durch die Atome des Phenylringes I bildet mit dem Lactonring einen Winkel von 13.4°, während der Phenylring II um 68.6 ° gegen diese Ebene verdreht ist. Die minimalen Kontaktabstände sind dabei ebenfalls unterschiedlich. Bei der Phenylgruppe I liegen sie mit 2.40 (4) Å und 2.31 (4) Å für die Abstände H 24 - O 6 und H 20 - O 7 in der Nähe der Summe der van der Waals - Radien. Die Phenylgruppe II zeigt dagegen mit minimalen Abständen von 3.07 (4) Å und 2.95 (4) Å zwischen H 14 - O 1 und H 18 - O 11 keine engen Kontaktabstände. Zur näheren Untersuchung dieses unterschiedlichen Verhaltens der beiden Phenylgruppen wurden daher Modellrechnungen mit dem Programm MPOT durchgeführt.

6.2. Modellrechnungen an der Vulpinsäure

In den Abbildungen 5 und 6 ist die Veränderung der Kontaktabstände bei Drehung der Phenylringe I und II um die Bindungen C 4 - C 19 und C 8 - C 13 dargestellt. Die experimentell gefundenen Werte erscheinen bei den Drehwinkeln υ_{Dreh} 0° und 360°. Die Unterschiede in den Abständen der chemisch äquivalenten Wasserstoffatome sind verursacht durch die Fehler der bei Röntgenexperimenten nur ungenau bestimmbaren Wasserstoffpositionen. Aus den Diagrammen ergibt sich, daß bei vollständiger Einebnung des Phenylrings I minimale Kontaktabstände von 2.27 Å bis 2.35 Å auftreten würden, die nach Ramachandran et. al. [21] an der unteren Grenze der möglichen Kontaktabstände liegen und damit zu einer planaren Anordnung nicht in Widerspruch stehen. Bei dem Phenylring II würden jedoch in diesem Fall Kontaktabstände von 1.5 Å bis 1.7 Å auftreten, so daß hier eine planare Anordnung sterisch nicht möglich ist.
Die sterisch günstigste Anordnung mit Kontaktabständen von 3.8 Å und 3.6 Å wäre demnach bei beiden Phenylringen bei einem Torsionswinkel von 90°, entsprechend einem Drehwinkel von ca. 80° bei Phenylring I und ca. 15° bei Phenylring II. Aus den in Abbildung 7 dargestellten Potentialverlauf bei Drehung des Phenylringes II ist jedoch ersichtlich, daß die Energie zwischen Torsionswinkeln von ca. 60° bis ca. 120° nahezu konstant bleibt mit nur einem sehr flachen Minimum bei 96°. Der experimentelle Wert des Torsionswinkels liegt mit 68.6° innerhalb dieses Bereichs, so daß angenommen werden kann, daß der noch mögliche Energiegewinn zumindest für eine Realisierung im Kristallgitter zu gering ist.
Die Abbildung 8 gibt eine bivariante Darstellung des Potentialverlaufs bei gleichzeitiger Drehung des Phenylrings II um die Bindung C 8 - C 13 und der Methylgruppe am O 11 um die Bindung C 9 - O 11. Hieraus ist ersicht-

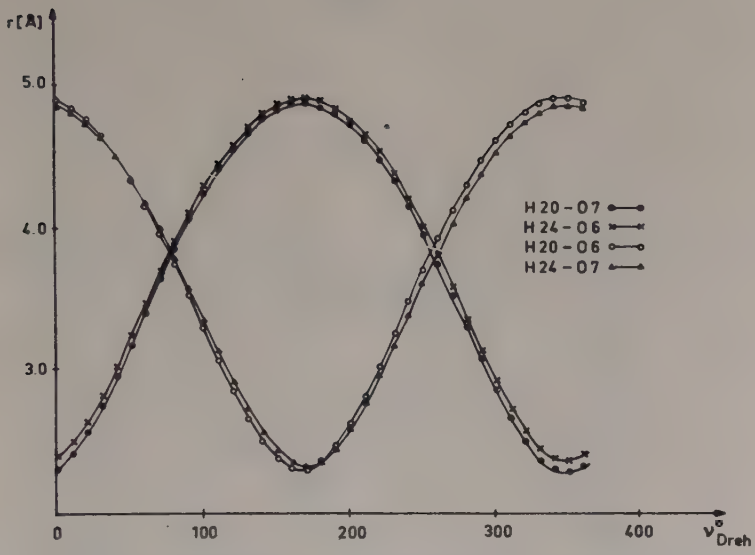


Abb. 5: Kontaktabstände bei Drehung des Phenylrings I

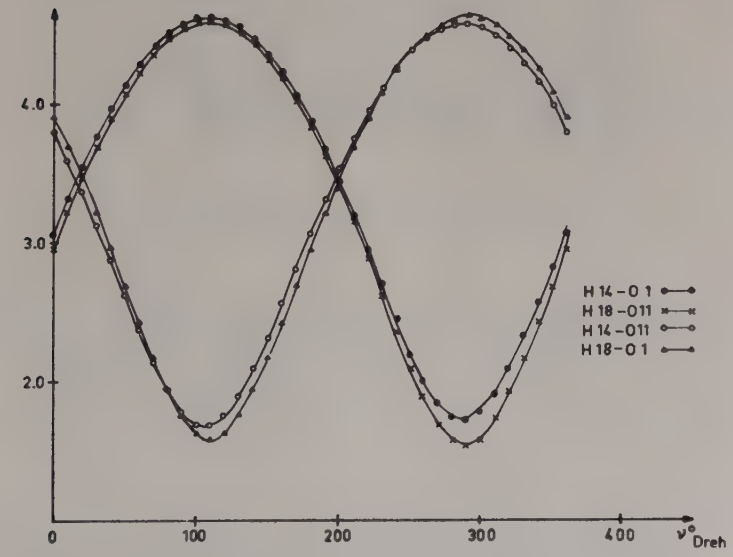


Abb. 6: Kontaktabstände bei Drehung des Phenylrings II

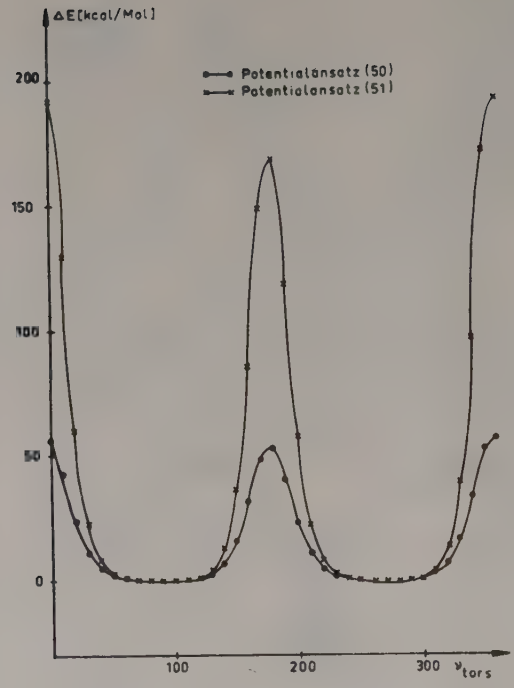


Abb. 7: Potentialverlauf bei Drehung des Phenylrings II

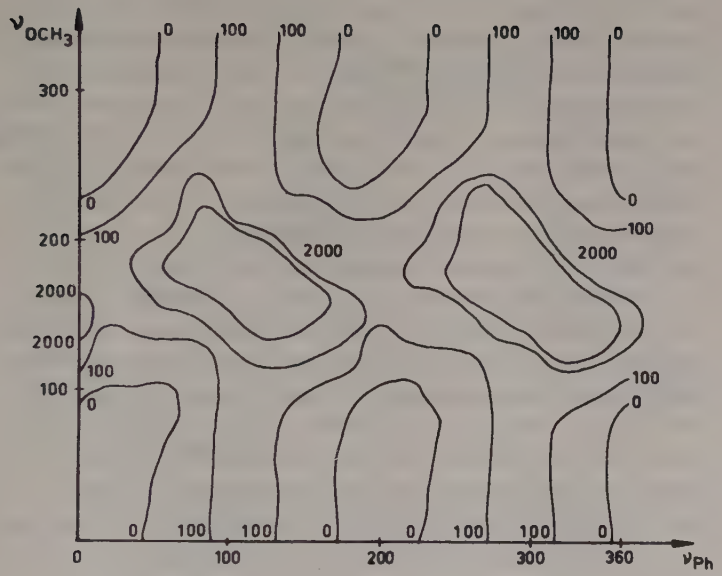


Abb. 8: Potentialverlauf bei Drehung des Phenylrings II und der Methoxygruppe

lich, daß in der Umgebung der experimentellen Lage (Drehwinkel 0°) eine Wechselwirkung zwischen diesen beiden Gruppen vernachlässigbar ist. Die experimentelle Lage der Phenylgruppe II erscheint daher im Wesentlichen begründet zu sein in einer sterisch günstigen Anordnung gegenüber den Atomen O 1 und O 11, wobei ein Torsionswinkel am Rande eines Energieplateaus eingenommen wird. Die Energiemaxima in der Abbildung 7 bei Drehwinkeln von 110° / 180° und -70° / 180° entsprechen einer sterisch "verbotenen" Anordnung mit planarer Phenylgruppe und zum O 10 trans ständiger Methylgruppe.
Aus den in Abbildung 9 dargestellten Potentialverlauf bei Drehung des Phenylrings I um die Bindung C 4 - C 19 ist ersichtlich, daß hier der experimentelle Wert des Torsionswinkels dicht am Energiemaximum liegt. Die Energiedifferenz zum Minimum bei einen Torsionswinkel von 90° beträgt bei den Potentialansatz von Giglio ca. 3.8 kcal, bei den Ansatz von Kitaigorodsky ca. 3.2 kcal, die Differenz zwischen Maximum und Minimum entspricht ca. 4.8 kcal bzw. 4.1 kcal. Diese Energiedifferenz liegt damit in der Größenordnung von Konjugationsenergien, die etwa von Williams [22] für das vergleichbare System p.p' Ditolyl über einen Potentialansatz mit 9.0 kcal berechnet wurde. Für Biphenyl erhielten Casalone et. al. [23] nach der Hückel - Methode ΔE = 7.6 kcal. Es kann daher angenommen werden, daß hier die sterisch ungünstige Stellung des Phenylringes I bedingt ist durch Teilnahme dieser Gruppe am System konjugierter Doppelbindungen der Lactongruppe. Die hierbei freiwerdende Konjugationsenergie reicht jedoch nicht aus, eine völlig planare Anordnung zu erreichen.
Entsprechend dem damit zu erwartenden Doppelbindungsanteil ist auch die Bindung C 19 - C 4 mit 1.469 (4) Å gegenüber der Bindung C 8 - C 13 mit 1.494 (4) Å verkürzt.

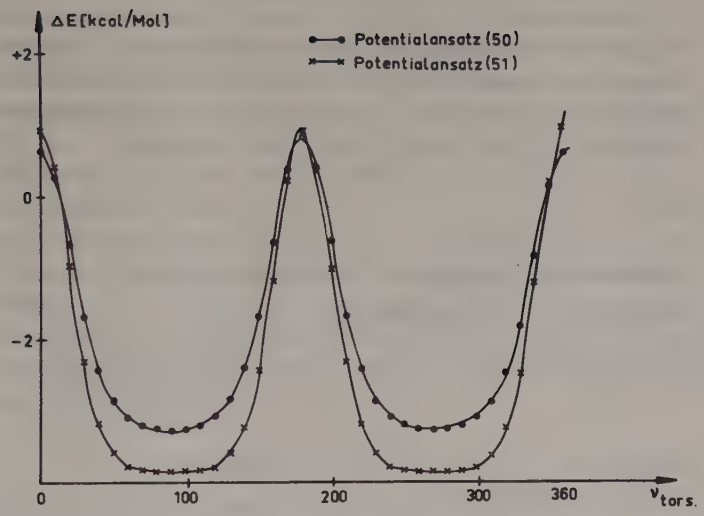


Abb. 9: Potentialverlauf bei Drehung des Phenylrings I

7. Die Strukturen des Tridentochinons und Secotridentochinons

7.1. Strukturbestimmung des Tridentochinons

Für die Messung wurde ein tief roter Kristall der ungefähren Ausdehnung 0.7 x 0.3 x 0.2 mm benutzt. Die ermittelten Kristalldaten sind in Tabelle 4 zusammengestellt.

Tab. 4

Tridentochinon $C_{26}H_{34}O_4$	M = 410.2 gr/Mol
Raumgruppe orthorhombisch	$P2_12_12_1$
Gitterkonstanten	a = 29.133 (5) Å
	b = 19.628 (5) Å
	c = 10.896 (4) Å
Zellvolumen	4643 $Å^3$
Dichte experimentell	ρ_{ex} = 1.16 (1) gr/cm^3
röntgenographisch	$\rho_{rö}$ = 1.173 (1) gr/cm^3
linearer Absorptionskoeffizient	μ = 6.20 cm^{-1}
für $CuK_{\bar{\alpha}}$ Strahlung mit	λ = 1.5418 Å

Aus einen Vergleich der röntgenographischen und der experimentellen Dichte ergab sich, daß die Elementarzelle 8 Moleküle, die asymmetrische Einheit mithin 2 unabhängige Moleküle enthalten mußte. Es wurden 4720 Reflexe mit Streuwinkeln zwischen 4.5° und 71.0° gemessen. 449 Reflexe wurden als unbeobachtet behandelt, da ihre gemessene Intensität geringer als der doppelte statistische Fehler war. Zur Strukturbestimmung und anschließender Verfeinerung dienten auch hier die Programme des X - RAY 72 [18] Systems. Das Phasenproblem wurde unter

Anwendung der Tangensformel nach (46) gelöst. Neben vier Reflexen zur Nullpunktfestlegung und Fixierung der enantiomorphen Form reichten zwei variable Reflexe aus zur Ermittelung der Phasen von 854 weiteren Reflexen. Aus einer mit diesen Reflexen berechneten Fouriersynthese konnten die Ortsparameter der Kohlenstoff- und Sauerstoffatome erhalten werden. Die Bestimmung der Wasserstoffatome und Verfeinerung der Parameter geschah analog zur Vulpinsäure unter Einführung von anisotropen Temperaturfaktoren für die Schweratome und isotrope für die Wasserstoffatome.
Nach Absorptionskorrektur der Daten und Einführung eines isotropen Extinktionsfaktors nach Larson [24] wurde als endgültiger R - Wert 3.4 % erreicht. Der Extinktionskoeffizient betrug hierbei 0.245 (3). Für Sauerstoff wurde eine anomale Dispersionskorrektur mit den von Engel [30] bestimmten Werten

$$\Delta f = 0.0 \quad \text{und} \quad \Delta f = 0.04$$

eingeführt. Die erhaltenen Atomparameter sind in Tabelle B 3, berechnete und beobachtete Strukturfaktoren in Tabelle B 4 zusammengestellt.

7.2. Strukturbestimmung des Secotridentochinons

Für die Messung wurde ein dunkelroter, blättchenförmiger Kristall mit den Abmessungen 0.3 x 0.2 x 0.03 mm verwendet. Die Kristalldaten sind in Tabelle 5 zusammengestellt.

Tab. 5

Secotridentochinon	$C_{26}H_{36}O_5$	M = 428.2 gr/Mol
Raumgruppe	orthorhombisch	$P2_12_12_1$
Gitterkonstanten		a = 48.972 (5) Å
		b = 11.511 (4) Å
		c = 8.695 (4) Å
Zellvolumen		4902 $Å^3$
Dichte experimentell		ρ_{ex} = 1.16 gr/cm^3
röntgenographisch		$\rho_{rö}$ = 1.160 gr/cm^3
linearer Absorptionskoeffizient für $CuK_{\bar{\alpha}}$ Strahlung mit		μ = 6.23 cm^{-1}
		λ = 1.5418 Å

Auch bei Secotridentochinon ergab sich aus einem Vergleich der berechneten und experimentellen Dichte, daß die Elementarzelle 8 Moleküle und damit die asymmetrische Einheit zwei unabhängige Moleküle enthalten mußte. Es wurden 4149 Reflexe mit Streuwinkeln zwischen 4.5° und 70° vermessen. Von diesen wurden 1141 als unbeobachtet eingestuft. Die Strukturbestimmung mit direkten Methoden gelang mit Hilfe des Programms MULTAN [25]. Zur Erzeugung der Phasen von 499 Reflexen dienten hier neben 4 Reflexen zur Festlegung des Ursprungs und der enantiomorphen Form drei weitere Reflexe. Aus einer mit diesen ermittelten Phasen berechneter Fouriersynthese konnten die Ortsparameter nahezu aller Kohlenstoff- und Sauerstoffatome bestimmt werden. Die fehlenden schweren Atome und die Wasserstoffatome wurden im Laufe der Verfeinerungen aus Differenzfouriersynthesen bestimmt, wobei für Wasserstoff isotrope, sonst anisotrope Temperaturfaktoren eingeführt wurden. Nach Absorptionskorrektur und Verfeinerung eines isotropen Extinktionsfaktors [24] betrug der R - Wert 4.5 %. Als Extinktionskoeffizient ergab sich hier 4.32.

Die ermittelten Atomparameter sind in Tabelle B 5, berechnete und beobachtete Strukturfaktoren sind in Tabelle B 6 zusammengestellt.

7.3. Diskussion

Die erhaltenen Bindungslängen und -winkel sind für Tridentochinon und Secotridentochinon in den Abbildungen 10 - 13 zusammengefaßt. Für Tridentochinon konnte damit die auf Grund der chemischen Untersuchungen von Steglich et. al. [26] postulierte Konstitution voll bestätigt werden.
Bei beiden Verbindungen zeigen jeweils die Bindungslängen und -winkel der zwei unabhängigen Moleküle der asymmetrischen Einheit Übereinstimmung im Rahmen der Fehlergrenzen. Ebenfalls sind die Bindungslängen von Tridentochinon und Secotridentochinon übereinstimmend.
Die Mittelwerte der Bindungslängen sind in Tabelle 6 zusammengefaßt, als Vergleich sind die entsprechenden Standardwerte angegeben.

Tab. 6 Mittelwerte der Bindungslängen in Å

	experim.	Standard [20]
$C_{sp_3} - C_{sp_2}$	1.506 (7)	1.53 (1)
$C_{sp_2} = C_{sp_2}$	1.324 (6)	1.337 (6)
$C_{sp_3} - C_{sp_3}$	1.532 (7)	1.541 (3)
$C_{sp_2} - O$	1.341 (5)	1.36 (1)
$C_{sp_2} = O$	1.223 (5)	1.23 (1)

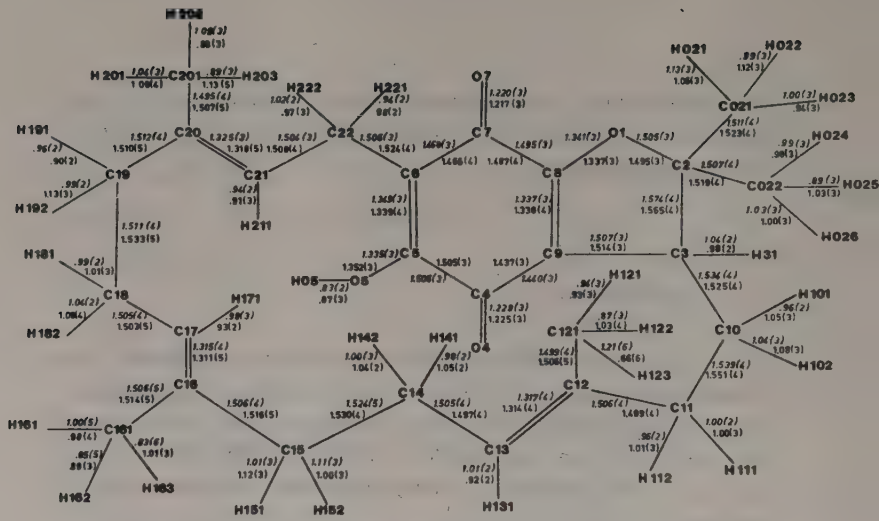


Abb. 10: Bindungslängen im Tridentochinon

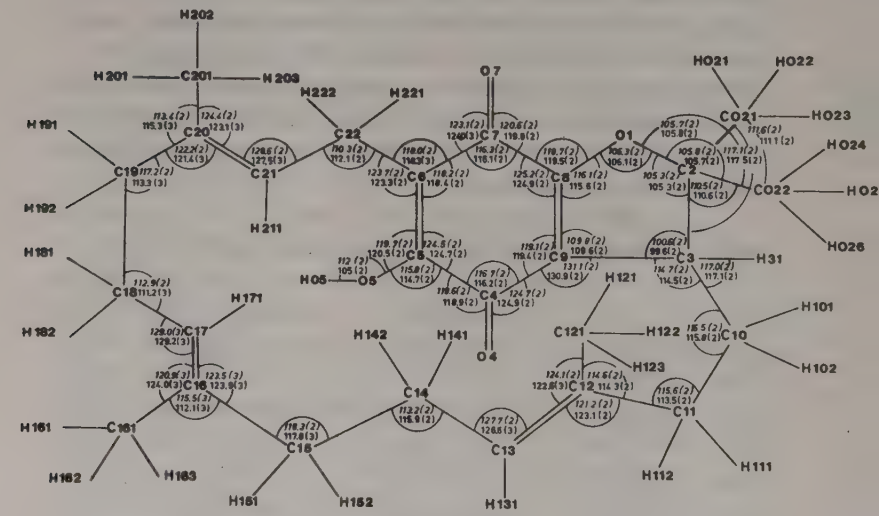


Abb. 11: Bindungswinkel im Tridentochinon

Kursive Zahlen : Molekül 1 der Tab. B3, normale Zahlen: Molekül 2 der Tab. B3

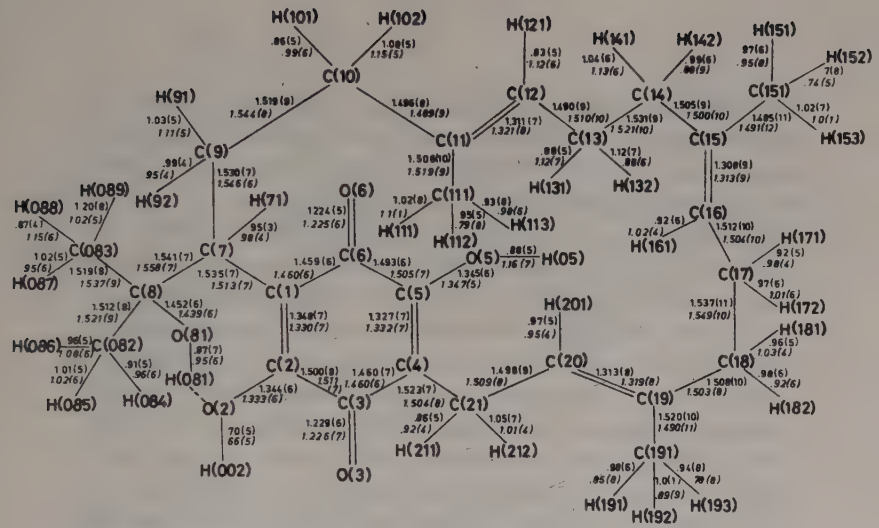


Abb. 12: Bindungslängen im Secotridentochinon

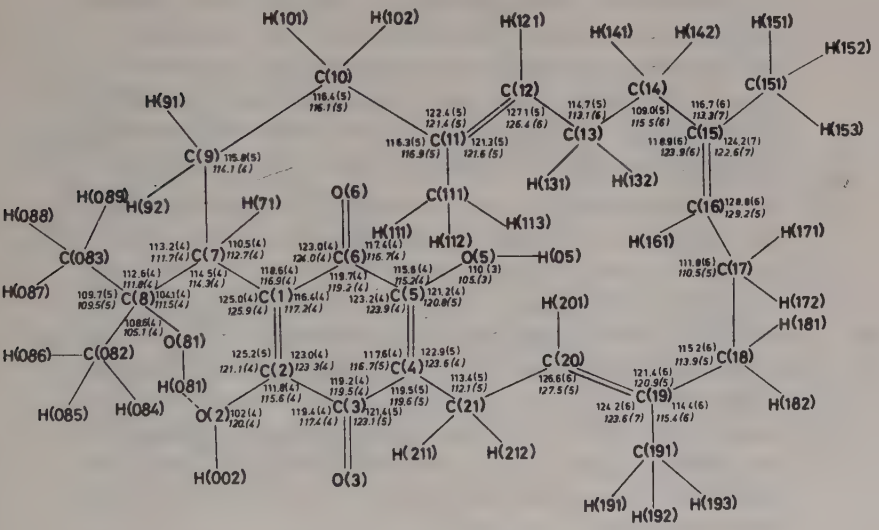


Abb. 13: Bindungswinkel im Secotridentochinon

Kursive Zahlen : Molekül I der Tab. B5, normale Zahlen: Molekül II der Tab. B5

Die Bindungslängen im Chinonsystem zeigen bei beiden Verbindungen übereinstimmend einen signifikanten Unterschied von ca. 0.03 Å zwischen den Kohlenstoff - Kohlenstoff - Einfachbindungen. Ähnliche Differenzen sind auch bei anderen substituierten Chinonen gefunden worden. Stam et. al. [27] führen als Erklärung der entsprechenden Unterschiede bei 2-Methyl-4,5-dimethoxy-p-chinon zum einen sterische Hinderung durch die benachbarten Methoxygruppen an, zum anderen einen Doppelbindungsanteil der verkürzten Bindungen durch Beteiligung entsprechender Resonanzstrukturen. Beide Annahmen können auch zur Erklärung der Verhältnisse bei Tridentochinon und Secotridentochinon dienen. Wie aus den in Abbildung 16 für beide Verbindungen zusammengestellten Kontaktabständen am Chinonring hervorgeht, treten auch hier zwischen den benachbarten Sauerstoffatomen mit ca. 2.64 Å recht geringe Abstände auf. Eine Aufweitung der Bindungen zwischen den zugehörigen Kohlenstoffatomen aus sterischen Gründen ist daher nicht ausgeschlossen. Die Unterschiede in den Kontaktabständen sind durch die Aufspaltung des Fünfringes in Secotridentochinon verursacht.

Das Chinonsystem ist bei Tridentochinon nahezu planar. Die maximale Abweichung von der Ausgleichsebene durch die Atome dieser Gruppe beträgt 0.02 Å bzw. 0.06 Å für die beiden unabhängigen Moleküle der asymmetrischen Einheit. Bei Secotridentochinon treten mit 0.13 Å und 0.07 Å höhere Abweichungen von den entsprechenden Ausgleichsebenen auf. Auf Grund der hohen Standardabweichungen ist jedoch die Signifikanz dieser Differenzen fraglich. Die zur Berechnung der Ausgleichsebenen benutzten Atome und ihre Abweichungen von den Ebenen sind in Tabelle 7 zusammengestellt.

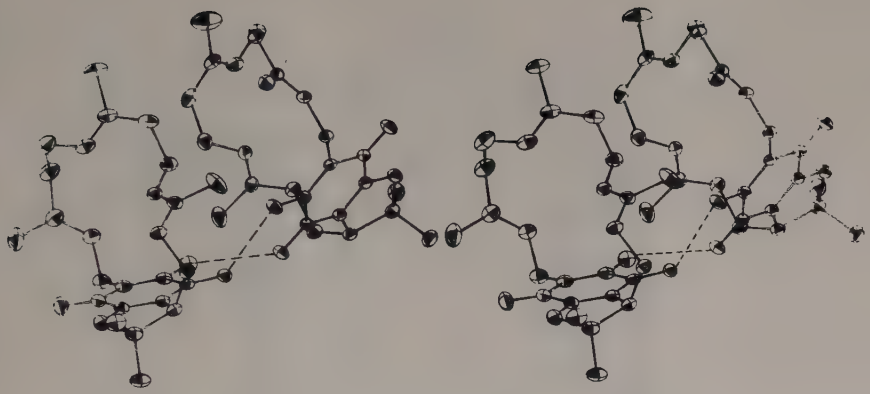


Abb. 14: Stereobildpaar der Moleküle des Tridentochinons

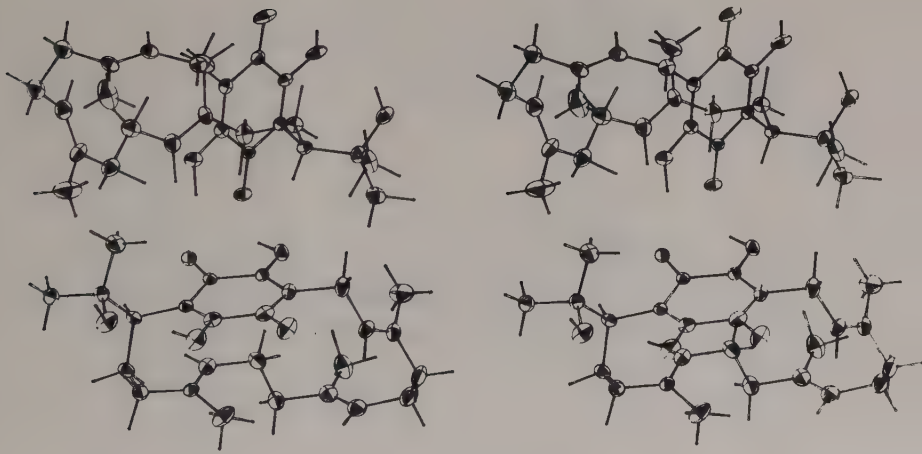


Abb. 15: Stereobildpaar der Moleküle des Secotridentochinons

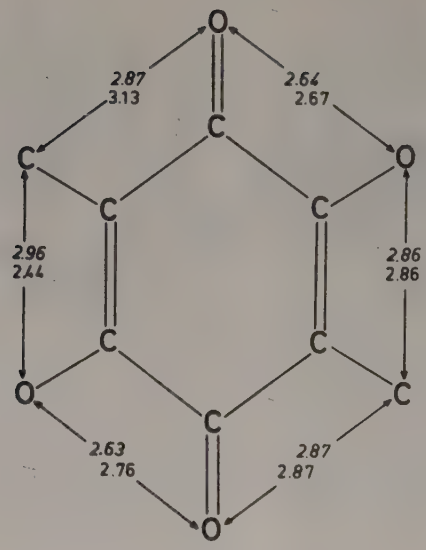


Abb. 16: Abstände am chinoiden System

Kursive Zahlen : Secotridentochinon

Normale Zahlen : Tridentochinon

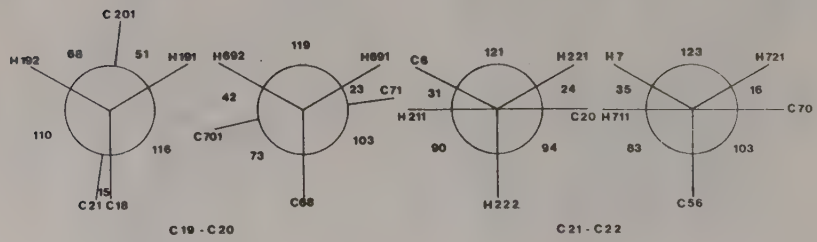


Abb. 17: Newmanprojektion für die Moleküle I und II des Tridentochinons in Richtung C19 - C20 und C21 - C22

Tab. 7 Atomabstände von den Ausgleichsebenen in Å

a) Tridentochinon

		Molekül I	Molekül II
C	4	-.007	-.011
C	5	-.001	.011
C	6	-.016	.038
C	7	-.003	-.001
C	8	.007	.033
C	9	.009	.038
O	4	-.009	-.057
O	5	.018	.011
O	7	.002	-.062

b) Secotridentochinon

C	1	.138	.072
C	2	.24	.011
C	3	-.18	.017
C	4	.038	.001
C	5	.028	.013
C	6	.008	.019
O	2	-.045	-.072
O	3	-.056	.006
O	5	.012	-.033
O	6	-.129	-.034

Tab. 8 Torsionswinkel

a) Tridentochinon

	Molekül I	Molekül II
C8 - C9 - C3 - C10	-117.0	-111.9
C9 - C3 - C10 - C11	46.1	43.9
C3 - C10 - C11 - C12	- 98.0	- 95.5
C10 - C11 - C12 - C13	127.8	117.0
C11 - C12 - C13 - C14	174.8	179.4
C12 - C13 - C14 - C15	-123.1	-101.5
C13 - C14 - C15 - C16	- 74.3	- 87.8
C14 - C15 - C16 - C17	- 23.7	11.3
C15 - C16 - C17 - C18	-176.1	-176.9
C16 - C17 - C18 - C19	144.4	129.1
C17 - C18 - C19 - C20	63.6	64.7
C18 - C19 - C20 - C21	13.8	-103.1
C19 - C20 - C21 - C22	-177.1	178.1
C20 - C21 - C22 - C6	145.1	-102.7
C21 - C22 - C6 - C5	- 99.3	- 78.8

b) Secotridentochinon

C2 - C1 - C7 - C9	- 63.8	- 59.8
C1 - C7 - C9 - C10	- 74.3	- 74.3
C7 - C9 - C10 - C11	63.9	64.3
C9 - C10 - C11 - C12	-114.5	-120.7
C10 - C11 - C12 - C13	178.7	180.9
C11 - C12 - C13 - C14	83.1	-159.0
C12 - C13 - C14 - C15	-172.3	164.0
C13 - C14 - C15 - C16	83.3	7.7
C14 - C15 - C16 - C17	-166.3	-172.5
C15 - C16 - C17 - C18	124.5	119.7
C16 - C17 - C18 - C19	- 58.9	- 58.7
C17 - C18 - C19 - C20	123.7	106.4
C18 - C19 - C20 - C21	175.5	181.7
C19 - C20 - C21 - C4	116.4	124.9
C20 - C21 - C4 - C5	- 97.4	- 80.6

Die in Tabelle 8 zusammengestellten Torsionswinkel der Seitenketten bei Tridentochinon und Secotridentochinon zeigen jeweils überwiegend nur geringe Differenzen zwischen den beiden unabhängigen Molekülen der asymmetrischen Einheit. Bei beiden Verbindungen treten jedoch an jeweils zwei Torsionswinkeln erhebliche Unterschiede auf. Die entsprechenden Newmanprojektionen [28] sind in den Abbildungen 17 und 18 dargestellt. Wie auch aus den Stereobildern 14 und 15 der beiden Molekülpaare ersichtlich, treten hierbei keine signifikanten Kontaktabstände zwischen den Molekülen der asymmetrischen Einheit und innerhalb der Gitterzelle auf.
Bei beiden Verbindungen sind die Moleküle der asymmetrischen Einheit über schwache Wasserstoffbrückenbindungen verbunden. Die entsprechenden Kontaktabstände sind in Tabelle 9 zusammengefaßt.

Tab. 9 Kontaktabstände in Wasserstoffbrückenbindungen in Å

a) Tridentochinon

O4 - O55	2.967 (3)	
O5 - O54	2.742 (3)	
HO5 - O54	1.99 (2)	
H5O5 - O4	2.22 (3)	

b) Secotridentochinon

		Symop.
O6 - O55	2.851 (5)	
O5 - O56	2.779 (5)	
HO6 - H551	1.92 (6)	
HO5 - O56	2.02 (6)	
O52 - O581	2.719 (5)	$-\frac{3}{2}-x,\ 1-y,\ -\frac{1}{2}+z$
H521 - O581	2.09 (5)	
O3 - O081	2.735 (6)	$-x,\ \frac{1}{2}+y,\ \frac{3}{2}-z$ (II)

O3 - HO81	1.95	(7)	$-x, \frac{1}{2}+y, \frac{3}{2}-z$
O081 - O2	2.603	(6)	
HOO2 - O081	1.93	(5)	
O581 - O52	2.920	(5)	
H580 - O52	1.14	(6)	

Nach Joesten und Schaad [19] wurde dabei eine Brückenbindung angenommen, wenn der Sauerstoff - Sauerstoff Kontaktabstand kleiner als die Summe der van der Waalsradien mit 3.04 Å war.
Bei Secotridentochinon ergibt sich somit auf Grund der zusätzlichen OH-Gruppe eine dreidimensionale Vernetzung der Moleküle im Gitter über schwache Brückenbindungen, wie in Abbildung 19 durch gestrichelte Linien angedeutet. Die in Abbildung 20 dargestellte Packung des Tridentochinons zeigt dagegen keine signifikanten Kontaktabstände.

7.4. Bestimmung der absoluten Konfiguration.

Nach Abschluß der Verfeinerungen wurden bei beiden Verbindungen Intensitätsdifferenzen für die Beugung an Bild- und Spiegelbildmolekül berechnet. Bei Tridentochinon wurden hierzu mit den experimentellen Orts- und Temperaturparametern der Atome Intensitätswerte I für I(hkl) und $I(\overline{hkl})$ berechnet.
Bei Secotridentochinon wurden mit Hilfe einer Änderung im least squares Programm des X - RAY - Systems die Größen

$$\Delta I = I(\overline{hkl}) - I(hkl)$$

direkt berechnet nach

$$\Delta I = 4\ (A\Delta A + B\Delta B)$$

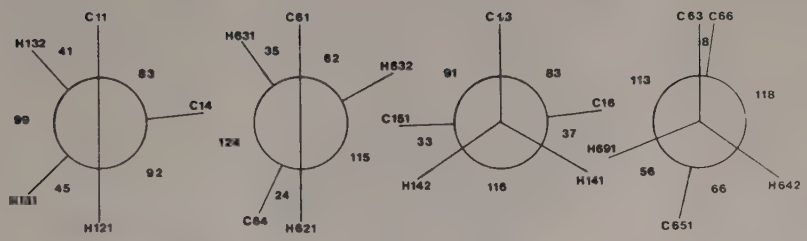


Abb. 18: Newmanprojektion für die Moleküle I und II des Secotridentochinons in Richtung C12 - C13 und C14 - C15

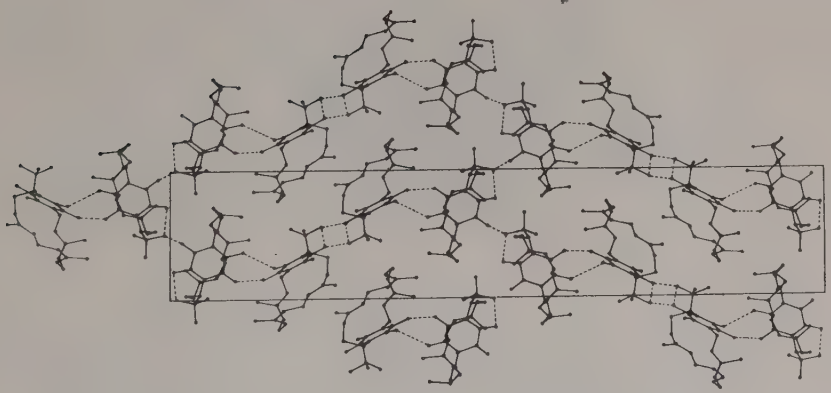


Abb. 19: X-Y Projektion des Zellinhaltes bei Secotridentochinon

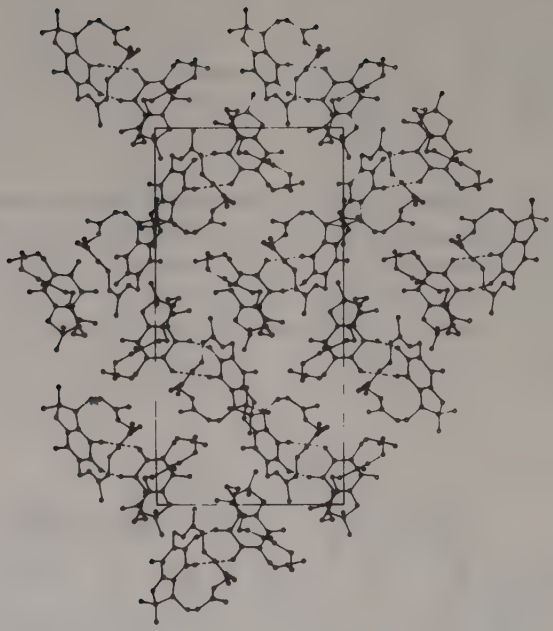


Abb. 20: X-Y Projektion des Zellinhaltes bei Tridentochinon

$$\text{mit} \quad A = \sum_j (f_j + \Delta' f_j) \cos (2\pi (hx + ky + lz))$$

$$\Delta A = \sum_j \Delta f_j'' \sin (2\pi (hx + ky + lz))$$

$$B = \sum_j (f_j + \Delta' f_j) \sin (2\pi (hx + ky + lz))$$

$$\Delta B = \sum_j \Delta f_j'' \cos (2\pi (hx + ky + lz))$$

Die experimentelle Bestimmung der Intensitätsdifferenzen wurde nach den bereits beschriebenen Verfahren auf dem Diffraktometer durchgeführt. Da auf Grund der Symmetrie im rhombischen System

$$I (hkl) = I (\bar{h}k\bar{l})$$
$$\text{und} \quad I (\bar{h}\bar{k}\bar{l}) = I (\bar{h}kl) = I (h\bar{k}l)$$

gilt, wurden dabei jeweils die Reflexpaare I (hkl), I ($\bar{h}k\bar{l}$) und I ($\bar{h}kl$), I ($h\bar{k}l$) vermessen.
Die Auswertung der Messungen wurde mit Hilfe des Programms BIJVOET vorgenommen. Hiermit wurde jeweils der Quotient Q_{th} der berechneten Intensitäten I (hkl) und I ($\bar{h}k\bar{l}$) verglichen mit den Quotienten

$$Q_1 = I (hkl) \; / \; I (\bar{h}kl)$$

$$Q_2 = I (\bar{h}k\bar{l}) \; / \; I (h\bar{k}l)$$

der gemessenen Intensitäten. Bei Übereinstimmung der experimentellen und theoretischen Quotienten folgte für die Faktoren V_i mit

$$V_i = \frac{Q_{th} - 1}{Q_i - 1} \qquad i = 1,2$$

ein positiver Wert, sonst ein negativer. Der Fehler SQ_i der experimentellen Quotienten wurde nach den Fehlerfortpflanzungsregeln aus den statistischen Fehlern σ der Einzelmessungen berechnet nach

$$SQ_i = Q_i \cdot \sqrt{\left(\frac{\sigma_j}{I_j}\right) + \left(\frac{\sigma_{j+1}}{I_{j+1}}\right)^2} \qquad \begin{matrix} i = 1,2 \\ j = 1,3 \end{matrix}$$

Als Signifikanzgrenze wurde das Kriterium

$$Q_{ex} - 1 > SQ_{ex}$$

gewählt, wobei Q_{ex} die arithmetischen Mittel von Q_i und SQ_i bezeichnen.

Um Absorptionseinflüsse zu eliminieren wurde eine Absorptionskorrektur [18] der Daten vorgenommen. In Tabelle 10 sind die Ergebnisse der Auswertung der Intensitätsunterschiede für Tridentochinon und Secotridentochinon vor und nach dieser Korrektur zusammengefaßt. Da bei beiden Verbindungen bei den Verfeinerungen die in Abbildung 21 dargestellte (S) Konfiguration am asymmetrischen Kohlenstoffatom vorlag, bedeutet Übereinstimmung zwischen beobachteten und berechneter Intensitätsunterschieden, daß diese enantiomere Form im Kristall tatsächlich vorliegt.

Werden nur die signifikanten Unterschiede berücksichtigt, so deuten somit bei Tridentochinon vor Absorptionskorrektur 78 % der Reflexquartetts, nach Absortionskorrektur 92 % die (S) Konfiguration an.

Bei Secotdidentochinon liegen auf Grund des kleineren Kristalls und des damit erheblich geringeren Streuvermögens diese Werte mit 76 % bzw. 78 % etwas niedriger. Zum Vergleich können die von L.H. Jensen et. al. [29] bei der Bestimmung der absoluten Konfiguration von (-) - (S) Warfarin gefundenen Werte dienen.

Tab. 10 Auswertung der Bijvoet Reflexe

	Anzahl	signifikant			nicht signifikant	
		positiv	negativ		positiv	negativ
Tridentochinon 144						
nicht absorptionskorrigiert	73	57 (78 %)	16 (22 %)	71	48 (68 %)	23 (32 %)
absorptionskorrigiert	105	97 (92 %)	8 (8 %)	39	29 (74 %)	10 (26 %)
Secotridentochinon 66						
nicht absorptionskorrigiert	17	13 (76 &)	4 (24 %)	49	32 (65 %)	17 (35 %)
absorptionskorrigiert	18	14 (78 %)	4 (22 %)	48	28 (58 %)	20 (42 %)

Diese Verbindung der Summenformel $C_{19}H_{16}O_4$ enthält in vergleichbarem Anteil zu Tridentochinon ebenfalls nur Sauerstoff als Atom mit geringer anomaler Dispersion. Nach Jensen et. al. waren hier 72 % - 86 % der Intensitätsunterschiede in Übereinstimmung mit der (S) - Konfiguration, die auch bereits auf Grund chemischer Untersuchungen postuliert worden war. Der Bereich der Prozentzahlen resultierte aus einer Auswertung der Reflexe in verschiedenen Gruppen.
Die bei Tridentochinon und Secotridentochinon erhaltenen Werte liegen somit in ähnlicher Größenordnung. Für beide Verbindungen kann daher auch hier die (S) - Konfiguration als gesichert angesehen werden.
Die Übereinstimmung der ermittelten absoluten Konfiguration bei beiden Verbindungen dient als zusätzliche Bestätigung, da bei der Darstellung von Secotridentochinon aus Tridentochinon [26] die Konfiguration am asymmetrischen Kohlenstoffatom unverändert bleiben mußte. Nach Steglich et. al. [26] ist die gefundene (S) - Konfiguration auch in Übereinstimmung mit der biogenetisch zu erwartenden Synthese von Tridentochinon aus Bovichinon.

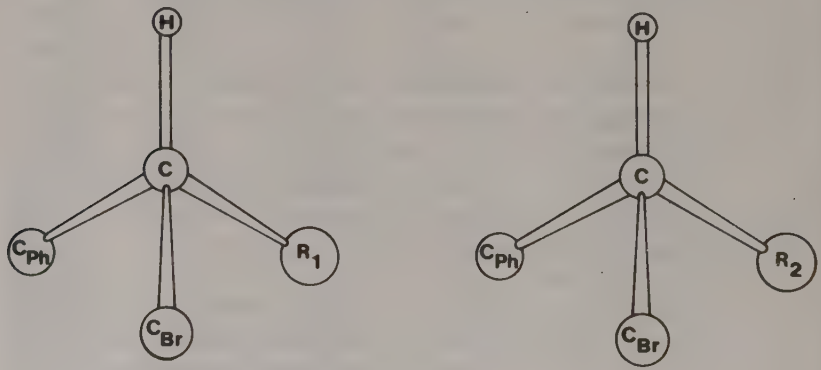


Abb. 21: Absolute Konfiguration des Tridentochinon und Secotridentochinon

8. Zusammenfassung

Durch röntgenographische Untersuchungen an Einkristallen konnten die Strukturen zweier Pilzfarbstoffe, der Vulpinsäure und des Tridentochinons, sowie eines Derivats des Tridentochinons geklärt werden.
Zur Durchführung der Messungen an der Vulpinsäure wurden Programme zur on - line Steuerung eines Siemens - Diffraktometers durch einen PDP - 15 Rechner entwickelt. Diese Programme dienten zur genauen Bestimmung von Gitterkonstanten und zur Durchführung und ersten Auswertung der Intensitätsmessungen.
Die Stellung der Phenylsubstituenten der Vulpinsäure wurde mit Hilfe zweier Potentialansätze untersucht. Die unterschiedlichen Anstellwinkel der Phenylringe sind demnach durch sterische Wechselwirkungen und unterschiedliche Beteiligung am mesomeren System verursacht.
Bei Tridentochinon konnte die auf Grund chemischer Untersuchungen von Steglich et. al. [26] erwartete Konstitution voll bestätigt werden.
Tridentochinon ist demnach das erste natürliche Ansachinon, dessen Makrocyclus völlig aus Kohlenstoffatomen besteht.
Unter Ausnutzung der anomalen Dispersion von Sauerstoff wurde durch Bestimmung der Intensitätsunterschiede von Bijvoet - Reflexen für Tridentochinon die (S) - Konfiguration ermittelt. Dieses Ergebnis wurde bestätigt durch Bestimmung der Struktur und absoluten Konfiguration des Secotridentochinons, eines Derivates des Tridentochinons.

A 1 Liste des Fortran Programms LAT

```
C------ GITTERKONSTANTEN BESTIMMUNG   20.3.76   HE
      COMMON/RD/ X(3,3),Y(3,3),Z(3,3),XHM(3),XIN(3),AMDA,IFIRST
      COMMON/MES/ITH,ICH,IPH,MINIMP,MINT,MAXT,ISTEP,TH,CH,PH,PCOR
     1,ITHT,ICT,IPT
      COMMON/PAR/IMP(200),ISTE,TH1,IPP,ICI,IC,TTS,ITIM
     1,PEAK,SIG,B1,B2,FL
      DATA RAD/57.29577951/
      CALL RDATA
      CALL WI(Y,Z,X,AMDA,PCOR,1)
      CALL CONAED
      PCOR=0.
      POLD=0.
C---- BEGINN DER MESSUNG
100   CONTINUE
      CALL WI(Y,Z,X,AMDA,PCOR,2)
      ITH=IFIX(100.*X(1,IFIRST))
      TH=100.*X(1,IFIRST)
      ICH=IFIX(100.*X(2,IFIRST))
      CH=100.*X(2,IFIRST)
      IPH=IFIX(100.*(X(3,IFIRST)+PCOR))
      PH=100.*(X(3,IFIRST)+PCOR)
      CALL MID(2)
      CALL MESLA(1)
      IF(IC.EQ.5) GOTO 1300
1600  CALL MID(1)
      CALL MESLA(2)
1300  CONTINUE
      IF(IC.NE.5) GOTO 1600
      IF(IFIRST.EQ.1) GOTO 116
      PCOR=POLD
116   X(1,IFIRST)=TH/100.
      X(2,IFIRST)=CH/100.
      X(3,IFIRST)=PH/100.-PCOR
      IF(IFIRST.GT.1) GOTO 117
      POLD=PCOR
117   CALL TRIM(Z,X,Y,AMDA,PCOR,1)
      CALL MID(3)
      CALL TRIM(Z,X,Y,AMDA,PCOR,2)
      CALL MID(3)
      DO 120 II = 1,3
      DO 120 JJ = 1 ,3
      X(II,JJ) = Y(II,JJ)
120   Y(II,JJ) = 0.
      DO 134 I=1,3
      IF(X(I,I)) 200,200,134
      IF(Y(I,I)) 200,200,134
134   CONTINUE
      DO 130 I=1,3
      XX=ABS(Z(IFIRST,I))
      XA=XX
```

```
      IF(XX.LT..0001) GOTO 130
      XX=XX+XIN(IFIRST)
      IF(XX.GT.XHM(IFIRST))GOTO 150
      Z(IFIRST,I)=XX*(Z(IFIRST,I)/(XA))
130   CONTINUE
      GOTO 100
150   IFIRST=IFIRST+1
      IF(IFIRST.LE.3) GOTO 100
      GOTO 776
200   CALL MID(4)
776   CONTINUE
      CALL DISAED
      STOP 777
      END
```

```
C------ GITERKONSTANTENBESTIMMUNG   20.3.76   HE
      SUBROUTINE RDATA
      DIMENSION TITLE(6),AMB(6)
      COMMON/RD/ X(3,3),Y(3,3),Z(3,3),XHM(3),XIN(3),AMDA,IFIRST
      COMMON/MES/ITH,ICH,IPH,MINIMP,MINT,MAXT,ISTEP,TH,CH,PH,PCOR
     1,ITHT,ICT,IPT
      DATA AMB/1.5418,1.5405,1.5443,.71069,.70926,.71354/
      DATA RAD/57.29577951/
      CALL SEEK(35,5HINPT2,3HSRC,IEV)
      CALL WAITFR(IEV)
      READ(35,10) TITLE
10    FORMAT(12A5)
      WRITE(32,20) TITLE
20    FORMAT(/,$ LATIM VERSION 12.4.76$,/,1X,12A5)
C----- EINLESEN DER GITTERKONSTANTEN
      DO 30 I=1,3
      READ(35,40) Y(1,I)
40    FORMAT(F10.5)
      IF(Y(1,I).GE.1.0) Y(1,I)=1./Y(1,I)
30    CONTINUE
C---- EINLESEN DER REZ. WINKEL
      DO 50 I=1,3
      READ(35,40) Y(2,I)
      IF(Y(2,I).EQ.90.) GOTO 55
      Y(2,I)=COS(Y(2,I)/RAD)
      GOTO 50
55    Y(2,I)=0.
50    CONTINUE
C---- EINLESEN DER MESSPARAMETER
```

```
C---- HKL IN Z
      DO 70 I=1,3
70    READ(35,75)(Z(I,J),J=1,3)
75    FORMAT(3F4.0)
C---- MAXHKL IN XHM
      READ(35,80) L
80    FORMAT(I1)
      AMDA=AMB(L+1)
      READ(35,75) (XHM(J),J=1,3)
      READ(35,75) (XIN(J),J=1,3)
      READ(35,85) MINIMP
      READ(35,85) MINT
      READ(35,85) MAXT
      READ(35,85) ISTEP
85    FORMAT(I5)
      CALL CLOSE(35)
      WRITE(32,901)
  901 FORMAT('OSERIE ? (FORMAT I1)')
      READ(32,911) IFIRST
  911 FORMAT(I1)'
      RETURN
      END
```

```
C---- MESSROUTINE FUER GITTERKONSTANTE  HE 20.3.76
      SUBROUTINE MESLA(IME)
      DIMENSION IMP(200)
      COMMON/MES/ITH,ICH,IPH,MINIMP,MINT,MAXT,ISTEP,TH,CH,PH,PCOR
     1,ITHT,ICT,IPT
      COMMON/PAR/IMP,ISTE,TH1,IPP,ICI,IC,TTS,ITIM
     1,PEAK,SIG,B1,B2,FL
      DATA BL/5H     /,UN/5HUNOBS/
      GOTO(1,331),IME
1     II=0
      ISTE=ISTEP
      FL=BL
      IPP=IPT=IPH
      ITIM=MINT
      ICI=ICT=ICH
      TH1=FLOAT(ITH)
      IC=4
      ICOR=0
99    IC=4
      ITHT=ITH-ISTE/2
90    IF(ICOR.GT.9) GOTO 999
```

```
      IF(IPT.LT.0) IPT=IPT+36000
      IF(IPT.GE.36000) IPT=IPT-36000
100   CALL RDPOS(ITO,ICHO,IPHO)
      CALL DIRECT(IPHO,IPT,IDIR)
      CALL POSIT(ITHT,ICT,IPT,IDIR)
      II=II+1
      CALL FILTER(0,1)
      PEAK=0.
      DO 200 I=1,ISTE
      CALL SCAN(IC,ITIM,1,IMP(I))
200   PEAK=PEAK+FLOAT(IMP(I))
      IF(IC.NE.4) GOTO 300
      IF(II.GE.2) GOTO 300
      TIM=FLOAT(ITIM)*FLOAT(MINIMP)/PEAK
      ITIM=IFIX(TIM)
      IF(ITIM.LE.MINT)GOTO 300
      IF(ITIM.GT.MAXT)ITIM=MAXT
      GOTO 100
300   B1=B2=0.
      IF(ITIM.LE.MINT) ITIM=MINT
      DO 310 I=1,5
      B1=B1+FLOAT(IMP(I))
310   B2=B2+FLOAT(IMP(ISTE+1-I))
      B1=B1*FLOAT(ISTE)/10.
      B2=B2*FLOAT(ISTE)/10.
      SIG=SQRT(PEAK)
      SIG2=2.*SIG
      DP=PEAK-B1-B2
      IF(IC.NE.4) GOTO 330
      IF(DP.LE.SIG2) FL=UN
330   CONTINUE
      RETURN
331   IF(FL.EQ.UN) GOTO 1000
      GOTO(500,600,999,400),IC
C---- NEUER THETA WERT IN TTS
400   DTH=ABS(TH1-TTS)
      ITH=IFIX(TTS)
      TH=TTS
      IF(DTH.LE.10.) GOTO 410
      ICOR=ICOR+1
      GOTO 99
410   IC=1
      ITHT=ITH
      IF(ICH.EQ.9000) GOTO 999
      IPT=IPH-ISTE/2
      GOTO 90
C---- DIFFERENZ ZU NEUEM PHI WERT IN TTS
500   IPH=IPT+IFIX(TTS)
      IPT=IPH
      PH=PH+TTS-FLOAT(ISTE)/2.
```

```
      DTH=ABS(TTS-FLOAT(ISTE)/2)
      ICOR=ICOR+1
      IC=3
      PCOR=PCOR+(TTS-FLOAT(ISTE)/2.)/100.
      IF(DTH.GT.5.) GOTO 99
510   IF(ICT.EQ.0) GOTO 1010
      IC=2
      IPT=IPH
      ICT=ICH-ISTE
      GOTO (90,901,1010,90),IC
C---- DIFFERENZ ZU NEUEM CHI WERT IN TTS
600   ICH=ICT+IFIX(TTS)
      ICT=ICH
      CH=CH+TTS-FLOAT(ISTE/2)
      DTH=ABS(TTS-FLOAT(ISTE)/2)
      ICOR=ICOR+1
      IC=4
      IF(DTH.LT.10.) GOTO 610
      ISTE=ISTEP
      GOTO 99
610   CONTINUE
      IC=3
      GOTO 1010
901   ISTE=2*ISTEP
      GOTO 90
999   CONTINUE
      IC=3
1010  ISTE=ISTEP
1000  CONTINUE
      IC=5
      CALL FILTER(0,2)
      RETURN
      END
```

```
C---- ROUTINE ZUR BERECHNUNG REZ. GITTERKONSTANTEN
C----    14.2.75   HE
      SUBROUTINE TRIM(FH,X,GH,AMBDA,PCOR,ID)
      DIMENSION GH(3,3),FH(3,3),X(3,3),Y(3,3),Z(3,3)
      DATA RAD/57.2957795/
      GOTO(1,1111),ID
1     DO 100 I=1,3
      DO 99 II=1,3
99    X(I,II)=X(I,II)/RAD
100   CONTINUE
      ZMV=.0001
      DO 80 II=1,3
      DO 85 JJ=1,3
85    GH(II,JJ)=0.
80    CONTINUE
      DO 110 I=1,3
      GH(I,1)=2.*SIN(X(1,I))*COS(X(2,I))*COS(X(3,I))/AMBDA
      GH(I,2)=2.*SIN(X(1,I))*COS(X(2,I))*SIN(X(3,I))/AMBDA
      GH(I,3)=2.*SIN(X(1,I))*SIN(X(2,I))/AMBDA
      DO 1100 JI=1,3
      GG=ABS(GH(I,JI))
      IF(GG.GE.ZMV) GOTO 1100
      GH(I,JI)=0.
1100  CONTINUE
      PA=ABS(PCOR)
C      IF(I.GT.1) GOTO 110
      GOTO 110
      IF(PA.LT.0.01) GOTO 110
      DO 10 II=1,3
      DO 15 JJ=1,3
      Y(II,JJ)=0.
15    Z(II,JJ)=0.
10    CONTINUE
      DO 20 II=1,3
20    Y(II,II)=1.
      Y(1,1)=COS(PCOR/RAD)
      Y(2,2)=Y(1,1)
      Y(1,2)=COS((90.-PCOR)/RAD)
      Y(2,1)=-Y(1,2)
      CALL INV(Y,Z)
      DO 25 II=1,3
      DO 30 JJ=1,3
30    Y(II,JJ)=0.
25    CONTINUE
      DO 35 II=1,3
      DO 45 JJ=1,3
      Y(JJ,II)=GH(JJ,II)
45    GH(JJ,II)=0.
35    CONTINUE
      CALL MULT(Z,Y,GH)
```

```
110   CONTINUE
      CALL INV(FH,X)
C---- MULTIPLIKATION VON GH MIT FH-1
      CALL MULT(GH,X,Y)
C---- MULTIPLIKATION VON Y' MIT Y
      DO 300 I=1,3
      DO 305 J=1,3
305   X(J,I)=Y(I,J)
300   CONTINUE
      CALL MULT(X,Y,GH)
C---- REZ GITTERKONSTANTE IN GH
1111  CONTINUE
      DO 400 I=1,3
400   X(I,1)=SQRT(GH(I,I))
      X(1,2)=GH(3,2)/(X(2,1)*X(3,1))
      X(2,2)=GH(3,1)/(X(1,1)*X(3,1))
      X(3,2)=GH(2,1)/(X(1,1)*X(2,1))
      DO 410 I=1,3
      XX=SQRT(1.-(X(I,2))**2)
      XX1=ABS(X(I,2))
      IF(XX1.GT.ZMV) GOTO 411
      X(I,3)=90.
      GOTO 410
411   X(I,3)=RAD*ATAN(XX/X(I,2))
410   CONTINUE
      DO 502 JJ=1,3
      DO 503 KK=1,3
      Y(JJ,KK)=GH(JJ,KK)
503   GH(JJ,KK)=0.
502   CONTINUE
      CALL INV(Y,GH)
      RETURN
      END
```

```
C----- ROUTINE ZUR BERECHNUNG DER EULER WINKEL  HE  20.3.76
      SUBROUTINE WI(Y,FH,Z,AMBDA,PCOR,ID)
      DIMENSION Y(3,3),FH(3,3),Z(3,3),GH(3,3),X(3,3),W(3,3)
      DATA RAD/57.2957795/
      GOTO(1,1111),ID
C------ KONSTRUKTION DER B MATRIX IN Y
1111  CALL INV(Z,Y)
      Y3 = SQRT(Y(3,3))
      Y2 = Y(3,2)/(SQRT(Y(3,3))*SQRT(Y(2,2)))
      DO 210 I=1,3
      DO 215 J=1,3
215   Y(I,J) = 0.
210   CONTINUE
      Y(1,1) = SQRT(Z(1,1))
      Y(2,1) = Z(2,1)/Y(1,1)
      Y(3,1) = Z(3,1)/Y(1,1)
      Y(2,2) = SQRT(Z(2,2))
      ZZ = SQRT(1. - (Y(2,1)/Y(2,2))**2)
      Y(2,2) = Y(2,2)*ZZ
      Y(3,3) = SQRT(Z(3,3))
      ZZ = SQRT(1. - (Y(3,1)/Y(3,3))**2)
      Y(3,2) = -Y(3,3)*ZZ*Y2
      Y(3,3) = 1./Y3
      ZMV=.0001
      DO 10 II=1,3
      DO 15 JJ=1,3
      Z(II,JJ)=0.
      W(II,JJ)=0.
      X(II,JJ)=0.
15    GH(II,JJ)=0.
10    CONTINUE
      DO 720 I=1,3
      DO 730 J=1,3
730   GH(1,J)=FH(I,J)
C      IF(I.GT.1) GOTO 100
      GOTO 100
      PA=ABS(PCOR)
      IF(PA.LE.0.01) GOTO 100
      DO 20 II=1,3
20    X(II,II)=1.
      X(1,1)=COS(PCOR/RAD)
      X(2,2)=X(1,1)
      X(1,2)=COS((90.-PCOR)/RAD)
      X(2,1)=-X(1,2)
      CALL MULT(X,Y,W)
      DO 30 II=1,3
      DO 35 JJ=1,3
      Y(II,JJ)=W(II,JJ)
      W(II,JJ)=0.
35    X(II,JJ)=0.
```

```
30    CONTINUE
100   CALL MULT(Y,GH,X)
      DS=SQRT(X(1,1)**2+X(1,2)**2+X(1,3)**2)
      Z(1,I)=AMBDA*DS/2.
      Z(2,I)=SQRT(1.-(Z(1,I)**2))
      XX1=ABS(Z(2,I))
      IF(XX1.GT.ZMV) GOTO 731
      Z(1,I)=90.
      GOTO 740
731   Z(1,I)=RAD*ATAN(Z(1,I)/Z(2,I))
740   XX1=SQRT(X(1,1)**2+X(1,2)**2)
      IF(XX1.GT.ZMV) GOTO 750
      Z(2,I)=90.
      GOTO 755
750   Z(2,I)=RAD*ATAN(X(1,3)/XX1)
755   XX1=ABS(X(1,2))
      XX2=ABS(X(1,1))
      IF(XX1.LT.ZMV) X(1,2)=0.
      IF(XX2.LT.ZMV) X(1,1)=0.
      IF(XX2.GT.ZMV) GOTO 760
      Z(3,I)=90.
      GOTO 765
760   Z(3,I)=RAD*ATAN(X(1,2)/X(1,1))
765   XX2=X(1,2)
      Z(3,I)=ABS(Z(3,I))
      XX1=X(1,1)
      IF(XX1.LE.ZMV.AND.XX2.GT.ZMV) Z(3,I)=180.-Z(3,I)
      IF(XX1.LE.ZMV.AND.XX2.LE.ZMV) Z(3,I)=180.+Z(3,I)
      IF(XX2.LE.ZMV.AND.XX1.GT.ZMV) Z(3,I)=360.-Z(3,I)
      IF(Z(3,I).GE.360.) Z(3,I)=Z(3,I)-360.
720   CONTINUE
      RETURN
1     DO 2000 I=1,3
2000  Z(I,I) = Y(1,I)**2
C----- Z(I,J)  : I  SPALTE,  J   ZEILE
      Z(2,1) = Y(1,1)*Y(1,2)*Y(2,3)
      Z(3,1) = Y(1,1)*Y(1,3)*Y(2,2)
      Z(3,2) = Y(2,1)*Y(1,2)*Y(1,3)
      Z(1,2) = Z(2,1)
      Z(1,3) = Z(3,1)
      Z(2,3) = Z(3,2)
C----- DIREKTE GITTERKONSTANTE NACH INVERTIERUNG IN Y
      CALL INV(Z,Y)
      RETURN
      END
```

```
C-------- 20.3.76     HE
      SUBROUTINE MID(ID)
      DIMENSION IMPC(200),IT(2),THETA(2),FLA1(4),IP(100)
      COMMON/PAR/ IMPC,ISTEP,TTH,IPH,ICH,IFLAG,TTS,ITIM
     1,PEAK,SIG,B1,B2,FL
      COMMON/RD/ X(3,3),Y(3,3),Z(3,3),XHM(3),XIN(3),AMDA,IFIRST
      COMMON/MES/ ITM,ICM,IPM,MINIMP,MINT,MAXT,ISTEM,TH,CH,PH,
     1PCOR,ITHT,ICT,IPT
      DATA FLA1 /5HPHI  ,5HCHI  ,5H???? ,5HTHETA/
      DATA UN /5HUNOBS/
      GOTO(1,1000,2000,3000),ID
1     SI=0.0
      SC=0.0
      DO 120 I=1,ISTEP
      SI=SI+FLOAT(IMPC(I))
      J = I + 1
120   SC=SC+FLOAT(J)*FLOAT(IMPC(I))
C------ SCHWERPUNKT
      TS=SC/SI
      IF(IFLAG-2)250,250,300
250   TTS=TS
      ICOR = IFIX(TTS - FLOAT(ISTEP)/2.)
      GOTO 999
300   TTS=TTH+TS-(FLOAT(ISTEP))/2.
      ICOR = IFIX(TS - FLOAT(ISTEP)/2.)
999   CONTINUE
      WRITE(32,310) PEAK,SIG,B1,B2,FL
310   FORMAT($  BRUTTO  $,F10.0,$   SIGMA $,F8.2,$  B1 $,F10.0
     1,$   B2 $,F10.0,15X,A5)
      IF(FL.NE.UN) WRITE(32,320) FLA1(IFLAG),ICOR
320   FORMAT(5X,A5,$ - KORREKTUR $,I5)
C------ OUTPUT REFLEXPROFIL
      IL = 0
776   DO 800 I=1,100
800   IP(I) = 0
      IP3 = 0
      ISCR = 2
      IF(ISTEP.LE.100) ISCR =1
      IST = ISTEP - ISCR
      DO 820 IP1=1,IST,ISCR
      IP2 = IP1 + ISCR -1
      IM = 0
      DO 810 I = IP1,IP2
810   IM = IM + IMPC(I)
      IM = IM - 2**IL
      IP3 = IP3 +1
      DO 830 J = 1,9
      IF(IM.LT.2**J) GOTO 820
830   IP(IP3) = J
820   CONTINUE
```

```
      DO 835 J = 1,IP3
      IF(IP(J).GT.0) GOTO 850
835   CONTINUE
      GOTO 900
850   WRITE(32,840) (IP(JJ),JJ=1,IP3)
840   FORMAT(10X,100I1)
      IL = IL + 1
      GOTO 776
900   CONTINUE
      RETURN
1000  WRITE(32,1010) (Z(IFIRST,JJ),JJ=1,3),ITM,ICM,IPM
1010  FORMAT(1H0,20(1H*),/,$   REFLEX  $,3F5.0,
     1$   POSITION  $,3I8)
      RETURN
2000  DO 2050 J=1,3
2050  WRITE(32,2010) (X(JJ,J),JJ=1,3)
2010  FORMAT(/,3(3X,F12.7))
      RETURN
3000  DO 3050 J=1,3
3050  WRITE(32,3010) (X(J,K),K=1,3),(Y(J,K),K=1,3)
3010  FORMAT(1X,6(F9.2,1X))
      RETURN
      END
```

```
C---- MATRIZEN MULTIPLIKATION 3 * 3  23.1.75   HE
      SUBROUTINE MULT(A,B,C)
      DIMENSION A(3,3),B(3,3),C(3,3)
      DO 100 I=1,3
      DO 110 J=1,3
      C(J,I)=0.
      DO 120 K=1,3
120   C(J,I)=C(J,I)+A(K,I)*B(J,K)
110   CONTINUE
100   CONTINUE
      RETURN
      END
```

```
C---- INVERTIERUNG EINER 3 X 3 MATRIX
C----  14.2.75   HE
      SUBROUTINE INV(FH,X)
      DIMENSION FH(3,3),X(3,3),Z(4),Y(3,3)
      ZMV=.00000001
      DO 200 I=1,3
      DO 210 J=1,3
      II=0
      DO 205 K=1,3
      IF(K-I) 203,205,203
203   DO 204 L=1,3
      IF(L-J) 202,204,202
202   II=II+1
      Z(II)=FH(K,L)
204   CONTINUE
205   CONTINUE
      X(J,I)=(Z(1)*Z(4)-Z(2)*Z(3))*(-1.)**(I+J)
210   CONTINUE
200   CONTINUE
      CALL MULT(FH,X,Y)
      DO 300 I=2,3
      DYY=ABS(1.-(Y(I,I)/Y(1,1)))
      IF(DYY.GT.0.000001) GOTO 400
300   CONTINUE
      SC=(Y(1,1)+Y(2,2)+Y(3,3))/3.
      SCC=ABS(SC)
      IF(SCC.GT.ZMV) GOTO 500
400   GOTO 431
500   DO 501 I=1,3
      DO 502 J=1,3
502   X(I,J)=X(I,J)/SC
501   CONTINUE
      RETURN
431   CONTINUE
      STOP 432
      END
```

A 2 Liste des Fortran Programms AEDTES

```
C      AED STEUERUNG
C
      REAL II,IBL,IBH,IL,IHY
      DIMENSION IH(3)
      DIMENSION FILEN(2)
      COMMON/ME1/ IM,ITH,ICH,IPH,ISL,ISH,IH
      COMMON/ME2/II,IBL,IBH,IL,IHY,DI,IT,SIG,IFIL,FLAG
      COMMON/ME3/IC,JX,ICC,ITYP
      COMMON/PAR/ ITM,MINT,MINC,MAXC,ICN
      DATA FILEN(1)/5HAEDRD/,FILEN(2)/4HFDEC/
C
C
      IC=0
      CALL RDPARA
      ICC=ICN
      CALL CONAED
      CALL DEFINE(36,25,1000,FILEN,JX,0,0,0,IEV)
      CALL WAITFR(IEV)
10    CALL RDDATA
      IF(IC.LT.0) GOTO 777
      GOTO(100,200,100,100,500),ITYP
100   CALL MESS(0)
      CALL DOUT
      GOTO 10
200   CALL ZEROCL
      CALL DOUT
      GOTO 10
500   CALL MESS(0)
      CALL DOUT
      ITYP=4
      CALL MESS(1)
      CALL DOUT
      GOTO 10
777   CONTINUE
      CALL DISAED
      STOP 1111
      END
```

```
      SUBROUTINE RDPARA
C
C     13/5/74 - DE   4.10.75 - HE
C
C     ROUTINE FOR INPUT OF AED PARAMETERS FROM TTY
C     FOR INITIALIZING MEASUREMENT
C     WRITTEN FOR RSX PLUS PHASE 2
C
C     TTY INPUT FROM LUN-32
C     TTY OUTPUT ON LUN-32
      COMMON/PAR/MAXTM,MINTM,MINCNT,MAXCNT,ISTART
C
200   FORMAT(/$  AEDTES VERSION 10.1.76 $)
      WRITE(32,200)
C
      WRITE (32,40)
40    FORMAT( $ STANDARD-PARAMETER:  JA = 0, NEIN = 1$)
      READ(32,5) IFLAG
      IF (IFLAG) 20,20,45
C
C     LIST OF STANDARD PARAMETERS
C
20    MINTM=3
      MAXTM=100
      MINCNT=10000
      MAXCNT=30000
      GOTO 68
C
C     PARAMETER INPUT FROM TTY
C
45    WRITE(32,50)
50    FORMAT($ MINIMALE MESSZEIT/SCHRITT IN MS:   (STANDARD   30 MS)$)
      READ(32,5)MINTM1
5     FORMAT(I5)
      MINTM=MINTM1/10
      WRITE(32,55)
55    FORMAT($ MAXIMALE MESSZEIT/SCHRITT IN MS:   (STANDARD  1000 MS)$)
      READ(32,5)MAXTM1
      MAXTM=MAXTM1/10
      WRITE(32,60)
60    FORMAT($ MINIMALE INTEGRALE IMPULSZAHL:    (STANDARD  10000)$)
      READ(32,5)MINCNT
      WRITE(32,65)
65    FORMAT($ MAXIMALE IMPULSZAHL JE S:  (STANDARD  30000)$)
      READ(32,5)MAXCNT
68    WRITE(32,8)
8     FORMAT($ START - REFLEX:$)
      READ(32,5)ISTART
      CONTINUE
      RETURN
```

```
      END



      SUBROUTINE RDDATA
C
C     13/5/74 - DE     4.10.75 - HE
C
C     ROUTINE FOR READING OF REFLECTION INFORMATION
C     FROM DECTAPE FILE 'AEDDT DEC' ON LUN-33
C     WRITTEN FOR RSX PLUS PHASE 2
      DIMENSION IH(3)
      COMMON/ME1/IM,ITH,ICH,IPH,ISTEP1,ISTEP2,IH
      COMMON/ME3/ISW,JX,IC,ITYP
C
C     ENTRY POINT; DETERMINE, IF FIRST ENTRY TO ROUTINE
      IF (ISW) 90,5,50
50    ASSIGN 60 TO JUMP
      GOTO 55
C     FIRST ENTRY, FIND START REFLECTION IN FILE
5     ASSIGN 30 TO JUMP
      ISW=1
      CALL SEEK (33,5HAEDDT,3HDEC,IEV)
      CALL WAITFR(IEV)
      ISTART=IC
      JX=1
      GOTO 55
30    IF (IC-ISTART) 55,60,90
C     READ REFLECTION INFORMATION
55    READ(33,END=90) IC,ITYP,IH,ITH,IPH,ICH,ISTEP1,ISTEP
      ISTEP2=ISTEP-ISTEP1
C     IS IT LAST REFLECTION IN FILE?
      IF (IC) 90,90,58
58    GOTO JUMP
90    ISW=-1
60    CONTINUE
      RETURN
      END
```

```
      SUBROUTINE MESS(IF)
C
C
      REAL II,IBL,IBH,IL,IHY
      COMMON/ME1/IM,ITH,ICH,IPH,ISL,ISH,IH
      COMMON/ME2/II,IBL,IBH,IL,IHY,DI,IT,SIG,IFIL,FLAG
      COMMON/PAR/ITM,MINT,MINC,MAXC,ICC
      DATA FLA1/2H*F/,FLA2/2H*B/,FLA3/2H*U/
C
      IFF=0
      FC=0.
      IS=ISL+ISH
      CALL RDPOS(ITO,ICHO,IPHO)
      CALL DIRECT(IPHO,IPH,IDIR)
      IF(IF.EQ.1) GOTO 100
      CALL POSIT(ITH,ICH,IPH,IDIR)
10    CALL FILTER(IFIL,1)
      CALL BACK(MINT,III)
      II=FLOAT(III)*100./FLOAT(MINT)
      IF(II.LE.FLOAT(MAXC)) GOTO 100
      IFIL=IFIL+1
      IF(IFIL.LE.5) GOTO 10
100   ITHL=ITH-ISL
      IF(IF.EQ.1) CALL SHUTTR(2)
      IF(IF.EQ.1) CALL FILTER(IFIL,1)
      CALL POSIT(ITHL,ICH,IPH,IDIR)
      IF(IF.NE.1) IT=MINT
105   ITBL=IT*ISL
      ITBH=IT*ISH
      CALL BACK(ITBL,III)
      IBL=FLOAT(III)
      DO 110 I=1,ISL
      CALL SCAN(4,IT,1,III)
      IL=IL+FLOAT(III)
110   FC=FC+FLOAT(I)*FLOAT(III)
      DO 120 I=1,ISH
      CALL SCAN(4,IT,1,III)
      IHY=IHY+FLOAT(III)
120   FC=FC+FLOAT(I+ISL)*FLOAT(III)
      CALL BACK(ITBH,III)
      IBH=FLOAT(III)
      II=IL+IHY-IBL-IBH
      IF(IF.EQ.1) GOTO 200
      DI=FLOAT(MINC)
      IF(II.GE.DI) GOTO 200
      IF(IFF.NE.0) GOTO 200
      IFF=1
      IF(II.LE.0.) II=1.
      TF=FLOAT(IT)*DI/II
      IT=IFIX(TF)
```

```
      IF(IT.GT.ITM) IT=ITM
      CALL POSIT(ITHL,ICH,IFH,IDIR)
      IBL=IL=IHY=IBL=II=FC=0.
      GOTO 105
200   SIG=SQRT(IBL+IL+IHY+IBH)
      TF=FLOAT(ITM)/FLOAT(IT)
      DI=(FC/(IL+IHY))-FLOAT(ISL+ISH+1)/2.
      II=II*TF
C     IL=IL*TF
C     IHY=IHY*TF
C     IBL=IBL*TF
C     IBH=IBH*TF
      SIG=SIG*SQRT(TF)
      CALL FILTER(0,2)
      IF(IF.EQ.1) CALL SHUTTR(0)
      TF=IBL/IBH
      IF(TF.GT.1.5.OR.TF.LT.0.5) FLAG=FLA2
      TF=IL/IHY
      IF(TF.GT.1.5.OR.TF.LT.0.5) FLAG=FLA1
      TF=II/SIG
      IF(TF.LT.2.) FLAG=FLA3
      RETURN
      END
```

```
      SUBROUTINE DOUT
C
C
      REAL II,IBL,IBH,IL,IHY
C
      DIMENSION IH(3)
      COMMON/ME1/IM,ITH,ICH,IPH,ISL,ISH,IH
      COMMON/ME2/II,IBL,IBH,IL,IHY,DI,IT,SIG,IFIL,FLAG
      COMMON/ME3/IC,JX,ICC,ITYP
      DATA BL/2H  /
C
      WRITE(36#JX) JX,ICC,ITYP,IH,IFIL,II,IBL,IL,IHY,IBH,SIG,IT
      IF(ITYP.EQ.2) WRITE(32,5)
5     FORMAT(2X)
      WRITE(32,10) ICC,IH,ITH,IPH,ICH,DI,II,IBL,IL,IHY,IBH,SIG,IT,
     1IFIL,FLAG
10    FORMAT(1X,I4,3I3,I5,I6,I5,F4.0,1X,5F8.0,F5.0,I4,1X,I1,A2)
      IF(ITYP.EQ.5) GOTO 30
      DO 20 I=1,3
20    IH(I)=0
      ITH=IT=IFIL=0
30    FLAG=BL
      DI=II=IBL=IL=IHY=IBH=SIG=0.
      RETURN
      END
```

A 2 Liste des Fortran Programms AEDS

```
C------ MESSUNG VON BIJVOET REFLEXEN IM ORTHORHOMB. SYSTEM
C
C
C        5.10.75   HE
C
      REAL II,IBL,IBH,IL,IHY
C
      DIMENSION B(3,3),S(3,3),IH(3),X(3,3),IR(3,2),A(2),BB(2),IX(3)
      DIMENSION FILEN(2),T(20)
      COMMON/CAED/B,S,IR,AMBDA,A,BB
      COMMON/ME/ITM,IM,ITH,ICH,IPH,ISL,ISH,II,IBL,IBH,IL,IHY,DI,IT,S
      DATA FILEN(1)/5HAEDRD/,FILEN(2)/4HFDEC/
      IC=0
      IPR=0
      CALL RDP(ITM,IM,IH,T)
      DO 5 I=1,4
      CALL DOUT2(T,IPR)
5     CALL CONV(T,X,IPR)
      CALL CONAED
      CALL DEFINE(36,25,1000,FILEN,JX,0,0,0,IEV)
      CALL WAITFR(IEV)
      JX=1
10    CALL RDD(IC,IH)
      IC=IC+1
      CALL ZEROCL
      ITYP=5
      DO 20 I=1,2
      DO 30 J=1,3
30    IX(J)=IR(J,I)
      CALL THETA(IX,ITH,ICH,IPH,ISL,ISH)
      CALL MESS1(0)
      CALL DOUT1(JX,IX,ITH,IPH,ICH,DI,II,IBL,IBH,IL,IHY,IT,SIG,ITYP)
      CALL MESS1(1)
20    CALL DOUT1(JX,IX,ITH,IPH,ICH,DI,II,IBL,IBH,IL,IHY,IT,SIG,ITYP)
      IS=0
      ISS=0
40    CALL THETA(IH,ITH,ICH,IPH,ISL,ISH)
      ITYP=1
      CALL MESS1(ISS)
      CALL DOUT1(JX,IH,ITH,IPH,ICH,DI,II,IBL,IBH,IL,IHY,IT,SIG,ITYP)
C------ ORTHORHOMBISCH : HKL = -H-KL
C------                  -H-K-L = H-KL = -H K L
      ISS=2
      IS=IS+1
      GOTO(50,60,50,10,70),IS
50    IH(1)=-IH(1)
      GOTO 40
60    IH(2)=-IH(2)
      GOTO 40
70    CONTINUE
```

```
      CALL DISAED
      STOP 7777
      END




      SUBROUTINE RDP(ITM,IM,IH,T)
C
C
C       5.10.75  HE
C
      DIMENSION B(3,3),S(3,3),IH(3),IR(3,2),A(2),BB(2),T(20)
      COMMON/CAED/B,S,IR,AMBDA,A,BB
      DATA RAD/57.2957795/
      WRITE(32,10)
10    FORMAT(/$ AEDS VERSION 27.11.75 $)
      CALL SEEK(33,5HINPT3,3HSRC,IEV)
      CALL WAITFR(IEV)
      CALL SEEK(35,5HINPT4,3HSRC,IEV)
      CALL WAITFR(IEV)
      READ(33,20)
      READ(33,40) T
40    FORMAT(20A4)
20    FORMAT(A5)
      WRITE(32,40) T
      READ(33,20)
      DO 50 I=1,6
      T(I)=0.
50    READ(33,60) T(I)
60    FORMAT(F15.7)
      READ(33,20)
      DO 70 I=1,3
      READ(33,80) IH
80    FORMAT(3I5)
      DO 70 J=1,3
70    S(J,I)=FLOAT(IH(J))
      DO 90 I=1,3
90    READ(33,20)
      DO 100 I=1,2
100   READ(33,110) (IR(J,I),J=1,3)
110   FORMAT(3I3)
      DO 120 I=1,5
120   READ(33,20)
      READ(33,60) AMBDA
      DO 130 I=1,2
130   READ(33,20)
```

```
      DO 140 I=1,2
140   READ(33,150) A(I),BB(I)
150   FORMAT(F15.7,/F15.7)
      WRITE(32,160)
160   FORMAT($ MAX. MESSZEIT $)
      READ(32,170) ITM
      WRITE(32,180)
180   FORMAT($ MESSGENAUIGKEIT $)
      READ(32,170) IM
170   FORMAT(I6)
      WRITE(32,190)
190   FORMAT($ STARTREFLEX$)
      READ(32,110) IH
      RETURN
      END
```

```
      SUBROUTINE RDD(IC,IH)
C
C      5.10.75  HE
C
      DIMENSION IH(3),IX(3)
      IF(IC.NE.0) GOTO 100
20    READ(35,30,END=99)IX
30    FORMAT(3I3)
      DO 40 I=1,3
      IF(IX(I).NE.IH(I)) GOTO 20
40    CONTINUE
      IC=1
      RETURN
100   READ(35,30,END=99) IH
      RETURN
99    CONTINUE
      STOP 1111
      END
```

```
      SUBROUTINE THETA(IX,ITH,ICH,IPH,ISL,ISH)
C
C
C      5.10.75  HE
C
      DIMENSION B(3,3),S(3,3),IH(3),X(3,3),IR(3,2),A(2),BB(2),IX(3)
      DIMENSION Y(3),Z(3)
      COMMON/CAED/B,S,IR,AMBDA,A,BB
      DATA RAD/57.2957795/
      DO 20 I=1,3
      Y(I)=0.
      DO 10 J=1,3
10    Y(I)=Y(I)+S(J,I)*FLOAT(IX(J))
20    CONTINUE
      DO 40 I=1,3
      Z(I)=0.
      DO 30 J=1,3
30    Z(I)=Z(I)+B(J,I)*Y(J)
40    CONTINUE
      DS=SQRT(Z(1)**2+Z(2)**2+Z(3)**2)
      SINT=AMBDA*DS/2.
      COST=SQRT(1.-SINT**2)
      SINC=Z(3)/DS
      SQ12=SQRT(Z(1)**2+Z(2)**2)
      COSC=SQ12/DS
      IF(SQ12.GE.0.00001.AND.Z(2).NE.0.) SINP=Z(2)/SQ12
      IF(SQ12.GE.0.00001.AND.Z(1).NE.0.) COSP=Z(1)/SQ12
      ITH=IFIX(100.*ATAN2(SINT,COST)*RAD)
      IF(SQ12.LE.0.00001) COSP = 0.
      IF(SQ12.LE.0.00001) GOTO 45
      IPH=IFIX(100.*ATAN2(SINP,COSP)*RAD)
      IPH=IABS(IPH)
      IF(ABS(SINP).LE.0.00001) IPH=0
45    IF(ABS(COSP).LE.0.00001) IPH=9000
C     IF(SINP.GT.0..AND.COSP.LT.0.) IPH=18000-IPH
C     IF(SINP.LT.0..AND.COSP.LT.0.) IPH=IPH+18000
C     IF(SINP.LT.0..AND.COSP.GT.0.) IPH=36000-IPH
      IF(SINP.LT.0.) IPH=36000-IPH
      ICH=IFIX(100.*ATAN2(SINC,COSC)*RAD)
      IF(COSC.LT.0.00001) ICH=9000
      IF(SINC.LT.0.00001) ICH=0
      ISL=IFIX(A(1)+BB(1)*SINT/SQRT(1.-SINT**2))
      ISH=IFIX(A(2)+BB(2)*SINT/SQRT(1.-SINT**2))
      RETURN
      END
```

```
      SUBROUTINE MESS1(IF)
C
C
C      5.10.75   HE
C
      REAL II,IBL,IBH,IL,IHY
      COMMON/ME/ITM,IM,ITH,ICH,IPH,ISL,ISH,II,IBL,IBH,IL,IHY,DI,IT,SIG
C
      FC=0.
      II=IBL=IBH=IL=IHY=0.
      III=0
      IFF=0
      IF(IF.EQ.1) CALL SHUTTR(2)
      IS=ISL+ISH
      CALL RDPOS(ITO,ICHO,IPHO)
      CALL DIRECT(IPHO,IPH,IDIR)
      ITHL=ITH-ISL
      CALL POSIT(ITHL,ICH,IPH,IDIR)
      CALL FILTER(0,1)
      IF(IF.EQ.0) IT=10
5     CONTINUE
      ITBL=IT*ISL
      ITBH=IT*ISH
      CALL BACK(ITBL,III)
      IF(III.EQ.0) CALL BACK(ITBL,III)
      IBL=FLOAT(III)
      DO 20 I=1,ISL
      CALL SCAN(4,IT,1,III)
      IL=IL+FLOAT(III)
20    FC=FC+FLOAT(I)*FLOAT(III)
      DO 30 I=1,ISH
      CALL SCAN(4,IT,1,III)
      IHY=IHY+FLOAT(III)
30    FC=FC+FLOAT(I+ISL)*FLOAT(III)
      CALL BACK(ITBH,III)
      IF(III.EQ.0) CALL BACK(ITBH,III)
      IBH=FLOAT(III)
      SIG=SQRT(IBL+IL+IHY+IBH)
      II=IL+IHY-IBL-IBH
      IF(IF.GE.1) GOTO 100
      IF(IFF.EQ.1) GOTO 100
      IF(II.GT.0.) TF=(SIG*100./(FLOAT(IM)*II))**2
      IF(TF.LE.1.) GOTO 100
      TF=FLOAT(IT)*TF
      IF(TF.GT.FLOAT(ITM)) TF=FLOAT(ITM)
      IF(II.LE.0.) TF=FLOAT(ITM)
      IT=IFIX(TF)
      II=IBL=IBH=IL=IHY=FC=0.
      CALL POSIT(ITHL,ICH,IPH,IDIR)
      IFF=1
```

```
      III=0
      GOTO 5
100   TF=FLOAT(ITM)/FLOAT(IT)
      CALL FILTER(0,2)
      II=II*TF
C     IL=IL*TF
C     IHY=IHY*TF
C     IBL=IBL*TF
C     IBH=IBH*TF
      SIG=SIG*SQRT(TF)
      DI=FC/(IL+IHY)
      DI=DI-FLOAT(ISL+ISH+1)/2.
      IF(IF.EQ.1) CALL SHUTTR(0)
      RETURN
      END




      SUBROUTINE DOUT1(JX,IH,ITH,IPH,ICH,DI,II,IBL,IBH,IL,IHY,IT,SIG,
     1ITYP)
C
C
C       5.10.75   HE
      REAL II,IBL,IBH,IL,IHY
C
      DIMENSION IH(3)
      IFF=0
      WRITE(36#JX)JX,IC,ITYP,IH,IFF,II,IBL,IL,IHY,IBH,SIG,IT
      WRITE(32,10)ITYP,IH,ITH,IPH,ICH,DI,II,IBL,IL,IHY,IBH,SIG,IT
10    FORMAT(1X,4I4,3I6,F4.0,6F10.0,I5)
      DI=II=IBL=IBH=IL=IHY=SIG=0.
      RETURN
      END
```

```
      SUBROUTINE DOUT2(T,IPR)
C
C
C         28.11.75    HE
C
C
      DIMENSION T(20)
      IPR=IPR+1
      GOTO( 10,10,40,10), IPR
10    WRITE(32,20) (T(I),I=1,6)
20    FORMAT($       GITTERKONSTANTEN$,/,30X,3F15.3,/,30X,3F15.3)
      GOTO 100
40    WRITE(32,30)
30    FORMAT($       AED GITTER$)
      GOTO 10
100   CONTINUE
      RETURN
      END




      SUBROUTINE CONV(T,X,IC)
C
C
C       5.10.75  HE
C
      DIMENSION B(3,3),S(3,3),X(3,3),IR(3,2),A(2),BB(2),T(20)
      COMMON/CAED/B,S,IR,AMBDA,A,BB
      DATA RAD/57.2957795/
      GOTO(5,10,5,100),IC
5     DO 20 I=4,6
20    T(I)=T(I)/RAD
      DO 30 I=1,3
30    B(I,I)=T(I)**2
C----- B(I,J) : I SPALTE, J ZEILE
      B(2,1)=T(1)*T(2)*COS(T(6))
      B(3,1)=T(1)*T(3)*COS(T(5))
      B(3,2)=T(2)*T(3)*COS(T(4))
      B(1,2)=B(2,1)
      B(1,3)=B(3,1)
      B(2,3)=B(3,2)
      CALL INV(B,X)
      DO 40 I=1,3
40    T(I)=SQRT(X(I,I))
      T(4)=X(3,2)/(T(2)*T(3))
      T(15)=SQRT(1.-T(4)**2)
```

```
      T(4)=ATAN2(T(15),T(4))*RAD
      T(5)=X(3,1)/(T(1)*T(3))
      T(15)=SQRT(1.-T(5)**2)
      T(5)=ATAN2(T(15),T(5))*RAD
      T(6)=X(2,1)/(T(1)*T(2))
      T(15)=SQRT(1.-T(6)**2)
      T(6)=ATAN2(T(15),T(6))*RAD
      RETURN
C     IF(IC.NE.0) GOTO 100
C     IC=1
10    DO 50 I=1,3
      T(I+6)=0.
      T(I+9)=0.
      DO 50 J=1,3
      T(I+6)=T(I+6)+S(J,I)*T(J)
50    T(I+9)=T(I+9)+S(J,I)*T(J+3)
      DO 60 I=1,6
60    T(I)=T(I+6)
      RETURN
100   IF(B(1,1).LE.1.) GOTO 150
      T(1)=B(3,3)
      T(2)=B(3,2)
      T(3)=B(2,2)
      DO 110 I=1,3
      DO 110 J=1,3
110   B(I,J)=X(I,J)
      X(2,2)=T(3)
      X(3,3)=T(1)
      X(3,2)=T(2)
150   B(1,1)=SQRT(B(1,1))
      B(2,1)=B(2,1)/B(1,1)
      B(3,1)=B(3,1)/B(1,1)
      B(1,2)=B(1,3)=B(2,3)=0.
      T(1)=B(2,1)/SQRT(B(2,2))
      T(1)=SQRT(1.-T(1)**2)
      B(2,2)=SQRT(B(2,2))*T(1)
      T(1)=B(3,1)/SQRT(B(3,3))
      T(1)=SQRT(1.-T(1)**2)
      B(3,2)=X(3,2)/SQRT(X(2,2)*X(3,3))
      B(3,2)=-B(3,2)*T(1)*SQRT(B(3,3))
      B(3,3)=1./SQRT(X(3,3))
      RETURN
      END
```

PROGRAM MPOT

A 3 Liste des Fortran Programms MPOT

```
      OVERLAY(POT,0,0)
      PROGRAM MPOT(INPUT,OUTPUT,SCRA1,          TAPE5=INPUT,
     1TAPE6=OUTPUT,TAPE7=SCRA1)
      DIMENSION NAME(70),X(70,3),CELL(4),ID3(70,4),COMP(4),
     1V(3),D3(70,4), IN(3),      IDD(3,20),        ANG(70,6)
      COMMON /LOC/ X,IC
      COMMON /CAL/ NAME
      COMMON /BOND/ ID3,D3,ANG
      COMMON /SYM/ ISYM,TRASS(8,3),ROT(8,3),CELL
      COMMON /TURN/ ID1(3),ID2(3),YY(3),IDD,NN,I1,I2,I3,FZ(4)
      DATA COMP/5HATOM ,5HUID  ,5HU    ,5HEND  /
      DATA RAD/57.2957795/,PI/3.141592654/,IBL/6H    /
      IC=0
      READ(5,10) CELL,ISYM
10    FORMAT(4F10.5,I10)
      CELL(4)=CELL(4)/RAD
      DO 11 I=1,ISYM
      READ(5,12) ((TRASS(I,J),ROT(I,J)),J=1,3)
12    FORMAT(6F10.0)
11    CONTINUE
1     IC=IC+1
2     READ(5,15) FD,ID,V
15    FORMAT(A5,2X,A6,3F8.4)
      DO 20 I=1,4
      IF(FD.EQ.COMP(I)) GOTO 30
20    CONTINUE
      GOTO 2
30    GOTO(40,2,2,100),I
40    DO 50 I=1,3
      X(IC,I)=V(I)*CELL(I)
50    NAME(IC)=ID
      X(IC,1)=X(IC,1)+X(IC,3)*COS(CELL(4))
      X(IC,3)=X(IC,3)*SIN(CELL(4))
      GOTO 1
100   IC=IC-1
      CALL OVERLAY(3HPOT,3,0,6HRECALL)
      I1=I2=I3=0
      CALL OVERLAY(3HPOT,2,0,6HRECALL)
      FZ(3) = FZ(1)          $       FZ(4) = FZ(2)
C----- BINDUNGSMATRIX IN ID3,BINDUNGSABSTAENDE IN D3
C-----                  DREHUNG UM Y GRAD UM EINE BINDUNG
C------ ANZAHL DER DREHUNGEN
      READ(5,120) N
120   FORMAT(I5)
C------ DREHACHSEN,WINKEL,ANZAHL DER DREHUNGEN
      DO 130 I=1,N
      READ(5,140) ID1(I),ID2(I),YY(I),IN(I)
140   FORMAT(2A6,F8.3,I5)
      I3=1        $     I4=10
C------ NAMEN DER ZU DREHENDEN ATOME
160   READ(5,150) (IDD(I,J),J=I3,I4)
150   FORMAT(10A6)
      IF(IDD(I,I4).EQ.IBL.OR.I4.EQ.20) GOTO 130
      I3=11       $     I4=20
      GOTO 160
130   CONTINUE
      I11=IN(1)     $     I22=IN(2)     $     I33=IN(3)
```

```
      DO 300 I1=1,I11
      NN=1
      CALL OVERLAY(3HPOT,1,0,6HRECALL)
      CALL OVERLAY(3HPOT,2,0,6HRECALL)
      IF(N.LE.1) GOTO 300
      DO 290 I2=1,I22
      NN=2
      CALL OVERLAY(3HPOT,1,0,6HRECALL)
      CALL OVERLAY(3HPOT,2,0,6HRECALL)
      IF(N.LE.2) GOTO 290
      DO 280 I3=1,I33
      NN=3
      CALL OVERLAY(3HPOT,1,0,6HRECALL)
      CALL OVERLAY(3HPOT,2,0,6HRECALL)
280   CONTINUE
290   CONTINUE
300   CONTINUE
C216  CALL OVERLAY(3HPOT,3,0,6HRECALL)
      DO 230 I=1,IC
      X(I,3)=X(I,3)/SIN(CELL(4))
      X(I,1)=X(I,1)-X(I,3)*COS(CELL(4))
      DO 220 J=1,3
220   X(I,J)=X(I,J)/CELL(J)
      WRITE(6,225) I,NAME(1),(X(I,J),J=1,3)
225   FORMAT(2X,I8,4X,A6,10X,3F10.4)
230   CONTINUE
      STOP 0002
      END
```

PROGRAM BIND

```
      OVERLAY(3,0)
      PROGRAM    BIND
      DIMENSION NAME(70),X(70,3),ID(70,4),NA(4),D(70,4),AN(70,6)
      COMMON /LOC/ X,IMAX
      COMMON /CAL/ NAME
      COMMON /BOND/ ID,D,AN
      DATA NA/2HH ,2HC ,2HO /,RAD/57.2957795/,PI/3.141592654/
      DATA NA(4)/2HN /
C
C     ORTHOGONALER ANGSTROEM RAUM
C
101   FORMAT(A2)
      DO 100 I=1,IMAX
      DO 1 J=1,4
      ID(I,J)=0
      D(I,J)=0.
1     AN(I,J)=0.
      AN(I,5)=AN(I,6)=0.
      ENCODE(2,101,NA1) NAME(I)
      IS=0
      DO 90 J=1,IMAX
      IF(I.EQ.J) GOTO 90
      ENCODE(2,101,NA2) NAME(J)
      A=0.
      DO 10 I1=1,3
10    A=A+(X(I,I1)-X(J,I1))**2
      A=SQRT(A)
      IF(A.GT.1.57) GOTO 90
C------ BINDUNG  ??   WELCHER TYP ??
      I2=0
      DO 20 I1=1,4
      IF(NA1.EQ.NA(I1)) I2=I2+I1
      IF(NA2.EQ.NA(I1)) I2=I2+I1
20    CONTINUE
      IF(I2.LE.1) STOP 1111
      IF(I2.EQ.4.AND.NA1.EQ.NA2) I2=I2+3
       IF(NA1.EQ.NA(4)) I2=I2+3
       IF(NA2.EQ.NA(4)) I2=I2+3
      GOTO(999,90,40,50,60,70,80,80,80,80,999,999,999,80),I2
C            HH  HC HO CO OO CC
40    IF(A.GE.1.38) GOTO 90
      GOTO 85
50    IF(A.GE.1.38) GOTO 90
      GOTO 85
60    IF(A.GE.1.5) GOTO 90
      GOTO 85
70    IF(A.GE.1.45) GOTO 90
      GOTO 85
80    IF(A.GE.1.57) GOTO 90
85    IS=IS+1
      IF(IS.GT.4) GOTO 888
      ID(I,IS)=J
      D(I,IS)=A
      GOTO 90
888   WRITE(6,800) NAME(I),(NAME(ID(I,II)),II=1,4),NAME(J)
800   FORMAT(*  ZU VIELE BINDUNGEN :*,5X,A6,10X,5(4X,A6))
      WRITE(6,810) (D(I,II),II=1,4),A
```

```
  810   FORMAT(*  ABSTAENDE*,32X,5F10.4)
        GOTO 100
  90    CONTINUE
        IJ=0
        DO 115 J=1,4
        IF(ID(I,J).EQ.0) GOTO 120
  115   CONTINUE
        J=5
  120   I1=J-1
        IF(I1.LE.1) GOTO 200
        DO 190 J=1,I1
        I2= J+1
        IF(I2.GT.I1) GOTO 190
        DO 180 JJ=I2,I1
        D1=D2=D3=0.
        DO 130 II=1,3
        D1=D1+(X(I,II)-X(ID(I,J),II))**2
        D2=D2+(X(ID(I,J),II)-X(I,II))*(X(ID(I,JJ) ,II)-X(I,II))
  130   D3=D3+(X(I,II)-X(ID(I,JJ),II))**2
        D2=D2/SQRT(D1*D3)
        D2=ACOS(D2)*RAD
        IJ=IJ+1
  180   AN (I,IJ)=D2
  190   CONTINUE
  200   CONTINUE
        IF(NA1.EQ.NA(1)) GOTO 100
        WRITE(6,94) NAME(I),(NAME(ID(I,II)),II=1,IS)
  94    FORMAT(*  BINDUNGEN *,2X,A6,4X,*ZU*,4X,4(4X,A6))
        WRITE(6,95) (D(I,II),II=1,IS)
  95    FORMAT(*  ABSTAENDE *,18X,4F10.4)
        WRITE(6,96)(AN(I,II),II=1,IJ)
  96    FORMAT(*  WINKEL  *,18X,6F10.4)
  100   CONTINUE
  999   CONTINUE
        END
```

```
      OVERLAY(1,0)
      PROGRAM TURN
      DIMENSION NAME(70),X(70,3),V(3),Z(3,3),ZZ(3,3),ZM(3,3),
     1ID1(3),ID2(3),YY(3),IDD(3,20)
      COMMON /LOC/ X,IC
      COMMON /CAL/ NAME
      COMMON /TURN/ ID1,ID2,YY,IDD,JJ,LL(3),FZ(4)
      DATA  IBL/6H      /,RAD/57.2957795/,PI/3.141592654/
      DO 120 I=1,IC
      IF(NAME(I).EQ.ID1(JJ)) I1=I
      IF(NAME(I).EQ.ID2(JJ)) I2=I
  120 CONTINUE
      IF(I1.EQ.0.OR.I2.EQ.0) STOP 0001
      DO 130 I=1,3
  130 V(I)=X(I2,I)
      THETA=SQRT((X(I1,1)-V(1))**2+(X(I1,2)-V(2))**2)
      THETA=ATAN(THETA/(X(I1,3)-V(3)))
      THETA=-(PI/2.-ABS(THETA))
      PHI=ATAN((X(I1,2)-V(2))/(X(I1,1)-V(1)))
      PHI=-ABS(PHI)
      IF((X(I1,1)-V(1)).LE.0.) PHI=-(PI-ABS(PHI))
      IF((X(I1,2)-V(2)).LE.0.) PHI=-PHI
      IF((X(I1,3)-V(3)).LE.0.) THETA=-THETA
C---- Z(I,J) : I SPALTE, J ZEILE
      Z(1,1)=COS(THETA)*COS(PHI)
      Z(2,1)=-COS(THETA)*SIN(PHI)
      Z(3,1)=-SIN(THETA)
      Z(1,2)=SIN(PHI)
      Z(2,2)=COS(PHI)
      Z(3,2)=0.
      Z(1,3)= SIN(THETA)*COS(PHI)
      Z(2,3)=-SIN(THETA)*SIN(PHI)
      Z(3,3)=COS(THETA)
  160 Y=YY(JJ)/RAD
      ZZ(1,1)=1.
      ZZ(2,2)=ZZ(3,3)=COS(Y)
      ZZ(2,3)=SIN(Y)
      ZZ(3,2)=-ZZ(2,3)
      ZZ(2,1)=ZZ(3,1)=ZZ(1,2)=ZZ(1,3)=0.
      DO 170 I=1,3
      DO 170 J=1,3
      ZM(J,I)=0.
      DO 170 K=1,3
  170 ZM(J,I)=ZM(J,I)+ZZ(K,I)*Z(J,K)
      CALL INV(Z)
      DO 180 I=1,3
      DO 180 J=1,3
      ZZ(J,I)=0.
      DO 180 K=1,3
  180 ZZ(J,I)=ZZ(J,I)+Z(K,I)*ZM(J,K)
      DO 200 I=1,20
      IF(IDD(JJ,I).EQ.IBL) GOTO 210
      DO 185 J=1,IC
      IF(NAME(J).EQ.IDD(JJ,I)) GOTO 190
  185 CONTINUE
      GOTO 200
  190 DO 195 L=1,3
```

```
      Z(1,L)=0.
      DO 195 K=1,3
195   Z(1,L)=Z(1,L)+ZZ(K,L)*(X(J,K)-V(K))
      DO 199 L=1,3
199   X(J,L)=Z(1,L)+V(L)
200   CONTINUE
210   CONTINUE
      END
```

```
      SUBROUTINE INV(M)
      REAL M
      DIMENSION M(3,3),A(3,3),B(3,3),C(4)
      SB=0.
      DO 100 I=1,3
      DO 110 J=1,3
      I1=0
      DO 120 K=1,3
      DO 130 L=1,3
      IF(K.EQ.I) GOTO 120
      IF(L.EQ.J) GOTO 130
      I1=I1+1
      C(I1)=M(L,K)
  130 CONTINUE
  120 CONTINUE
  110 A(I,J)=(C(1)*C(4)-C(2)*C(3))*(-1.)**(I+J)
  100 CONTINUE
      DO 200 I=1,3
      DO 205 J=1,3
      DO 210 K=1,3
  210 B(I,J)=B(I,J)+A(K,I)*M(J,K)
  205 CONTINUE
  200 CONTINUE
C     WRITE(6,201) ((B(I,J),I=1,3),J=1,3)
  201 FORMAT(3(/,20X,3F15.6))
      DO 220 I=1,3
      AB=ABS(B(I,I))
      IF(AB.LT.0.00001) GOTO 300
      DB=ABS(B(1,1)-B(I,I))
      IF(DB.GT.0.00001) GOTO 300
  220 SB=SB+B(I,I)
      SB=SB/3.
      DO 230 I=1,3
      DO 240 J=1,3
      B(I,J)=0.
  240 M(I,J)=A(I,J)/SB
  230 CONTINUE
      RETURN
  300 CONTINUE
      DO 310 J=1,3
      WRITE(6,320) (M(I,J),I=1,3),(A(I,J),I=1,3),(B(I,J),I=1,3)
  320 FORMAT(3(10X,3F10.5))
  310 CONTINUE
      STOP 3100
      END
```

```
      OVERLAY(2,0)
      PROGRAM    POT
      DIMENSION NAME(70),X(70,3),TRANS(8,3),ROT(8,3),IT(20),TR(13,3)
     $,IS(20),CC(20),V(3),IC(20),IC1(20),TT(3),RR(3),CELL(4),
     $NA(4),XY(70,3),ID(70,4)
      COMMON /LOC/ XY,IMAX
      COMMON /CAL/ NAME
      COMMON /SYM/ ISYM,TRANS,ROT,CELL
      COMMON /BOND/ ID,D3(70,4),ANG(70,6)
      COMMON /TURN/ ID1(3),ID2(3),YY(3),IDD(3,20),NN,NL(3),FZ(4)
      DATA IBL/6H      /,RAD/57.2957795/
      DATA NA/2HH ,2HC ,2HO /
      DATA NA(4)/2HN /
      DATA TR/1.,0.,0.,1.,1.,0.,1.,-1.,-1.,0.,-1.,1.,1.,0.,1.,0.,1.,
     $0.,1.,1.,1.,0.,-1.,1.,-1.,1.,0.,0.,1.,0.,1.,1.,1.,0.,1.,
     $1.,1.,1.,-1./
      IF(FZ(4).EQ.0..AND.ISYM.NE.1) GOTO 10
      GOTO 111
10    WRITE(6,11)
11    FORMAT(*    TRANSLATIONS KODIERUNG *)
      DO 20 I=1,13,4
      J = I+ 3
      IF(J.GT.13) J = 13
20    WRITE(6,30) (K,(TR(K,L),L=1,3),K=I,J)
30    FORMAT(4(3X,I2,5X,3F5.0))
111   DO 100 I=1,20
      CC(I)=100.
      IC(I)=IBL
100   IC1(I)=IBL
      FZ(1) = 0.    $       FZ(2) = 0.
C------ RELATIVE KOORDINATEN .....
      DO 50 I=1,IMAX
      X(I,3)=XY(I,3)/SIN(CELL(4))
      X(I,1)=XY(I,1)-X(I,3)*COS(CELL(4))
      X(I,2)=XY(I,2)
      DO 40 J=1,3
40    X(I,J)=X(I,J)/CELL(J)
50    CONTINUE
101   FORMAT(A2)
      DO 1000 I=1,IMAX
      ENCODE(2,101,NA1) NAME(I)
      DO 900 J=1,IMAX
      ENCODE(2,101,NA2) NAME(J)
      I1=0
      DO 109 II=1,4
      IF(NA1.EQ.NA(II)) I1=I1+II
      IF(NA2.EQ.NA(II)) I1=I1+II
109   CONTINUE
      IF(I1.EQ.4.AND.NA1.EQ.NA2) I1=I1+3
      IF(I1.EQ.0) STOP 0001
       IF(NA1.EQ.NA(4)) I1=I1+3
       IF(NA2.EQ.NA(4)) I1=I1+3
      DO 800 IJ=1,ISYM
      A=0.
      DO 110 II=1,3
      TT(II)=TRANS(IJ,II)
110   RR(II)=ROT(IJ,II)
```

```
      DO 351 ITT=1,2
      DO 350 IJI=1,13
      IF(IJ.NE.1.AND.IJI.NE.1) GOTO 104
      IF(J.LE.I) GOTO 300
      DO 120 II=1,4
      IF(J.EQ.ID(I,II)) GOTO 300
120   CONTINUE
C------  ELIMINIERUNG VON 1 - 3 WW BEI KONTAKTABSTAENDEN
      DO 140 II =1,IMAX
      I2=0
      DO 135 III = 1,4
      IF(I.EQ.ID(II,III)) I2=I2+1
      IF(J.EQ.ID(II,III)) I2=I2+1
135   CONTINUE
      IF(I2.GE.2) GOTO 300
140   CONTINUE
104   A=0.
      DO 130 II=1,3
130   V(II)=(X(I,II)-TT(II)-X(J,II)*RR(II))*CELL(II)
      V(1)=V(1)+V(3)*COS(CELL(4))
      V(3)=V(3)*SIN(CELL(4))
      A=  V(1)**2+V(2)**2+V(3)**2
      A=SQRT(A)
      IF(A.GE. 10.) GOTO 300
C     AC (1971) ,B27, 2112
C      V(R) = A * EXP( -B * R )/ R**D  - C/ R**6
      GOTO(999,150,160,170,180,190,200
C           H-H H-C H-O C-O O-O C-C
     1,205,215,225,999,999,999,235),I1
C------  H - H KONTAKT
150   R0=2.66
      A0 = 6600.   $    B = 4.08    $   C = 49.02   $   D  = 0.
      GOTO 250
C------ H - C KONTAKT
160   R0 = 3.22
      A0 =44800.   $    B = 2.04    $   C = 125.0   $   D  = 6.
      GOTO 250
C------ H - O KONTAKT
170   R0=3.00
      A0 =42000.   $    B = 2.04    $   C = 132.7   $   D  = 6.
      IF(A.GT.2.) GOTO 250
C------ WASSERSTOFFBRUECKE  ?
      IF(NA1.EQ.NA(1)) IW=I
      IF(NA2.EQ.NA(1)) IW=J
      IW=ID(IW,1)
      ENCODE(2,101,NA3) NAME(IW)
      IF(NA3.NE.NA(3)) GOTO 250
C     R0=1.6
      GOTO 250
C------  C - O KONTAKT
180   R0=3.56
      A0 = 278700.    $    B = 0.    $    C = 342.3  $  D = 12.
      GOTO 250
C------ O - O KONTAKT
190   R0=3.33
      A0 = 259000.    $    B = 0.    $    C = 358.5  $  D = 12.
      GOTO 250
```

```
C------ C - C KONTAKT
200   R0=3.78
      A0 = 301200.    $    B = 0.     $    C = 327.2  $  D = 12.
      GOTO 250
C------ H - N  KONTAKT
205   R0=3.06
      A0 =  52100.    $    B = 2.04   $    C = 132.0  $  D =  6.
      GOTO 250
C------ N - C  KONTAKT
215   R0=3.61
      A0 = 340000.    $    B = 0.     $    C = 340.    $   D = 12.
      GOTO 250
C------ N - O  KONTAKT
225   R0=3.39
      A0 = 316200.    $    B = 0.     $    C = 356.    $   D = 12.
      GOTO 250
C------ N - N  KONTAKT
235   R0 = 3.44
      A0 = 387000.    $    B = 0.     $    C = 354.    $   D = 12.
250   FZ(1)=FZ(1)+ 42000.* EXP(-13.6 *A/R0)-.119*(R0/A)**6
      FZ(2) = FZ(2) +  A0 *(EXP( -B * A))/(A **D)  - C/(A **6 )
      DO 260 II=1,20
      IF(A.GT.CC(II)) GOTO 260
      DO 255 III=1,20
      I4=20-III
      IF(I4.LT.II) GOTO 259
      CC(I4+1) = CC(I4)
      IC(I4+1) = IC(I4)
      IC1(I4+1) = IC1(I4)
      IT(I4+1) = IT(I4)
255   IS(I4+1) = IS(I4)
259   CC(II)=A
      IC(II)=NAME(I)
      IC1(II)=NAME(J)
      IT(II)=IJI*(-1)**(ITT+1)
      IS(II)=IJ
      GOTO 300
260   CONTINUE
300   CONTINUE
      IF(ISYM.EQ.1) GOTO 800
      DO 310 II=1,3
310   TT(II)= TRANS(IJ,II)+TR(IJI,II)*(-1.)**(ITT+1)
350   CONTINUE
351   CONTINUE
C------ EIN ATOM ABGEARBEITET ..............
800   CONTINUE
900   CONTINUE
1000  CONTINUE
      WRITE(6,1010) FZ(1),FZ(2),NN,YY(NN),NL(NN)
1010  FORMAT(10(2H *),*   F  =*,E15.7,*   FF  =*,E15.7,*    ACHSE*,I4,
     1*    WINKEL  *,F7.1,2H *,I4)
      FZ(1) = FZ(1) - FZ(3)
      FZ(2) = FZ(2) - FZ(4)
      WRITE(6,1011) FZ(1),FZ(2)
1011  FORMAT(10(2H *),*   DELTA E1  =*,E15.7,*    DELTA E2 =*,E15.7)
      WRITE(6,1020) (IC(I),I=1,20)
1020  FORMAT(/,5X,20A6)
```

```
      WRITE(6,1030) (IC1(I),I=1,20)
1030  FORMAT(* ZU   *,20A6)
      WRITE(6,1040) (CC(I),I=1,20)
1040  FORMAT(* D    *,20F6.2)
      WRITE(6,1050) ((IS(I),IT(I)),I=1,20)
1050  FORMAT(  * SYMOP*,20(I2,I4),/)
      CONTINUE
      GOTO 9999
999   CONTINUE
      STOP 0002
9999  CONTINUE
      END
```

A 4 Liste des Fortran Programms BIJVOET

```
      PROGRAM BIJVOET(INPUT,OUTPUT,DATEN,TAPE5=INPUT,TAPE6=OUTPUT,
     1TAPE7=DATEN)
      DIMENSION ASTAR(6),IN(5),IH(3),IK(3),FIN(4),SIGI(4),Q(2),SQ(2),
     1FF(2),FLAG(5),FL(3)
      DATA RAD/57.2957795/,AMBDA/1.5418/,S2/1.414213562/
      DATA FLAG/2H  ,2H +,2H -,2H I,2H W/
      READ(5,10)        IAED
10    FORMAT(        I2)
      WRITE(6,30)
30    FORMAT(1H1,2X,*  H   K   L *,4X,*QTH*,6X,*SQTH*,7X,*QEX*,6X,
     1*SQEX*,7X,*Q(1)*,6X,*SQ(1)*,7X,*Q(2)*,6X,*SQ(2)*,6X,*V1*,6X,
     2*V2*,8X,*V*)
      IS=IP=IM=INS=IPI=IMI=0
100   READ(5,110) IH,FITH,DITH,SIGITH
      DITH=DITH-FITH
110   FORMAT(3I4,3F7.0)
      FL(1)=FL(2)=FL(3)=FLAG(1)
      IF(FITH.LE.0.) GOTO 999
      IF(IAED.EQ.2) GOTO 160
      IF(IAED.EQ.3) GOTO 1600
C----- AED1 FUEFWERTMESSUNG
      DO 150 I=1,4
120   READ(7,130) IK,IN
130   FORMAT(5X,3I4,8X,5(I7,1X))
      DO 140 J=1,3
      IF(IABS(IK(J)).NE.IH(J)) GOTO 120
140   CONTINUE
      FIN(I)=FLOAT(IN(1) +IN(3)+IN(5)-IN(2)-IN(4))
      SIGI(I)=FLOAT(IN(1)+IN(2)+IN(3)+IN(4)+IN(5))
      SIGI(I)=SQRT(SIGI(I))
150   CONTINUE
      GOTO 200
C------ AED2 NETTOINTENSITAET
160   DO 190 I=1,4
170   READ(7,180) IK,FIN(I),SIGI(I)
180   FORMAT(1X,3I4,F10.0,40X,F10.0)
      DO 185 J=1,3
      IF(IABS(IK(J)).NE.IH(J)) GOTO 170
185   CONTINUE
190   CONTINUE
      GOTO 200
C----- HKL KARTEN
1600  DO 1900 I=1,4
1700  READ(7,1800) IK,FIN(I),SIGI(I),BSTAR
1800  FORMAT(15X,3I4,F10.2,F10.4,8X,F7.4)
        FIN(I) =FIN(I)*BSTAR
      DO 1850 J=1,3
      IF(IABS(IK(J)).NE.IH(J)) GOTO 1700
1850  CONTINUE
1900  CONTINUE
200   QTH=FITH/(FITH+DITH)
      SQTH=S2*QTH*SIGITH/FITH
      Q(1)=FIN(1)/FIN(2)
      Q(2)=FIN(3)/FIN(4)
      SQ(1)=Q(1)*SQRT((SIGI(1)/FIN(1))**2 + (SIGI(2)/FIN(2))**2)
      SQ(2)=Q(2)*SQRT((SIGI(3)/FIN(3))**2 + (SIGI(4)/FIN(4))**2)
      QEX=0.5*(Q(1)+Q(2))
```

```
      SQEX=0.5*(SQ(1)+SQ(2))
      F=(QTH-1.)/(QEX-1.)
      FF(1)=(QTH-1.)/(Q(1)-1.)
      FF(2)=(QTH-1.)/(Q(2)-1.)
      FL(1)=FLAG(2)
      IF(F.LT.0.) FL(1) = FLAG(3)
      SIG=ABS(QEX-1.) -SQEX
      IF(SIG.LT.0.) FL(2) = FLAG(4)
      FC=(Q(1)-1.)/(Q(2)-1.)
      IF(FC.LT.0.) FL(3)=FLAG(5)
      WRITE(6,210) IH,QTH,SQTH,QEX,SQEX,Q(1),SQ(1),Q(2),SQ(2),FF,F,FL
210   FORMAT(2X,3I4,11(F10.4),3A2)
      IF(FL(2).NE.FLAG(1)) GOTO 300
      IF(FL(3).NE.FLAG(1)) GOTO 300
C------ SIGNIFIKANTE REFLEXE
      IF(FL(1).EQ.FLAG(2)) IP=IP+1
      IF(FL(1).EQ.FLAG(3)) IM=IM+1
      IS=IS+1
      GOTO 100
C------ INSIGNIFIKANTE REFLEXE
300   INS=INS+1
      IF(FL(1).EQ.FLAG(2)) IPI=IPI+1
      IF(FL(1).EQ.FLAG(3)) IMI=IMI+1
      GOTO 100
999   WRITE(6,310) IS
310   FORMAT(/,*   SIGNIFIKANTE REFLEXE   : *,I4)
315   FORMAT(20X,*ANZAHL   PLUS *,I4,5X,*MINUS  *,I4)
      WRITE(6,315) IP,IM
      WRITE(6,320) INS
320   FORMAT(/,*   INSIGNIFIKANTE REFLEXE  :  *,I4)
      WRITE(6,315) IPI,IMI
      STOP 0001
      END
```

Tabelle B1 Atomparameter und Temperaturfaktoren der Vulpinsäure

Anisotroper Temperaturfaktor: $f_{t\ aniso}=\exp[-2\pi^2(U_{11}h^2a^{*2}+U_{22}k^2b^{*2}-U_{33}l^2c^{*2}+2U_{12}hka^*b^*+2U_{13}hla^*c^*+2U_{23}klb^*c^*)]$

Isotroper Temperaturfaktor: $f_{t\ iso}=\exp[-2\pi^2U(2\sin\theta/\lambda)^2]$, Standardabweichungen in Klammern.

Atom	x	y	z	$U_{11}\cdot10^2$ oder $U\cdot10^2$	$U_{22}\cdot10^2$	$U_{33}\cdot10^2$	$U_{12}\cdot10^2$	$U_{13}\cdot10^2$	$U_{23}\cdot10^2$
O (1)	0.8068(3)	-0.0185(3)	0.61776(8)	8.3(2)	5.5(1)	5.0(1)	0.6(1)	1.6(1)	-0.8(1)
C (2)	0.7287(4)	0.1266(4)	0.5940 (1)	5.7(2)	5.1(2)	5.3(2)	-0.5(1)	1.4(1)	-1.0(1)
C (3)	0.7136(4)	0.1042(4)	0.5387 (1)	5.5(2)	5.7(2)	4.8(2)	-0.3(1)	1.1(1)	-0.9(1)
C (4)	0.7795(4)	-0.0495(4)	0.5295 (1)	5.8(2)	5.7(2)	4.7(2)	-0.1(1)	0.8(1)	-1.1(1)
C (5)	0.8420(5)	-0.1281(4)	0.5792 (1)	7.5(2)	6.0(2)	6.0(2)	0.1(2)	1.6(2)	-1.5(2)
O (6)	0.9125(4)	-0.2618(3)	0.5928 (1)	12.4(2)	6.5(2)	6.5(1)	2.4(2)	1.3(1)	-0.6(1)
O (7)	0.6433(3)	0.2174(3)	0.50311(8)	9.2(2)	6.9(2)	5.0(1)	1.8(1)	1.5(1)	-0.7(1)
C (8)	0.6888(4)	0.2510(4)	0.6250 (1)	6.0(2)	5.4(2)	5.2(2)	-0.7(1)	1.5(1)	-1.1(1)
C (9)	0.6080(4)	0.4130(4)	0.6037 (1)	7.5(2)	5.4(2)	6.1(2)	-0.5(2)	3.0(2)	-1.4(2)
O(10)	0.5747(4)	0.4555(3)	0.55862(9)	12.3(2)	6.4(1)	5.8(1)	1.8(1)	3.2(1)	-0.2(1)
O(11)	0.5718(3)	0.5103(3)	0.64038(9)	10.6(2)	5.1(1)	6.9(1)	0.1(1)	3.8(1)	-1.2(1)
C(12)	0.4910(7)	0.6739(5)	0.6237 (2)	17.6(5)	5.0(2)	10.9(3)	1.8(3)	8.7(3)	-0.0(2)
C(13)	0.7317(4)	0.2266(4)	0.6821 (1)	6.2(2)	6.4(2)	4.9(2)	0.0(2)	1.4(1)	-1.5(1)
C(14)	0.6461(5)	0.1070(5)	0.7051 (1)	8.2(2)	7.4(2)	5.6(2)	-0.5(2)	1.5(2)	-0.7(2)
C(15)	0.6884(6)	0.0849(6)	0.7582 (1)	12.0(3)	9.1(3)	6.1(2)	0.8(3)	2.9(2)	-0.1(2)
C(16)	0.8160(6)	0.1816(7)	0.7882 (1)	10.6(3)	12.8(4)	5.0(2)	3.0(3)	1.2(2)	-1.6(2)
C(17)	0.9014(6)	0.2999(7)	0.7659 (2)	8.4(2)	14.5(4)	6.6(3)	-0.8(3)	0.7(2)	-3.9(3)
C(18)	0.8589(5)	0.3256(6)	0.7129 (1)	8.4(3)	11.1(3)	6.2(2)	-2.1(2)	1.9(2)	-3.1(2)
C(19)	0.7975(4)	-0.1252(4)	0.4805 (1)	5.3(2)	6.6(2)	5.1(2)	-0.3(2)	0.5(1)	-1.9(2)
C(20)	0.7737(5)	-0.0291(5)	0.4361 (1)	7.0(2)	8.1(3)	5.3(2)	0.9(2)	1.0(2)	-1.4(2)
C(21)	0.7943(5)	-0.0986(6)	0.3900 (1)	7.7(2)	10.9(3)	4.9(2)	0.8(2)	1.0(2)	-1.6(2)
C(22)	0.8380(5)	-0.2679(6)	0.3877 (2)	7.7(3)	11.1(3)	6.8(2)	-0.3(2)	1.7(2)	-4.1(3)
C(23)	0.8623(7)	-0.3633(6)	0.4310 (2)	12.9(4)	7.9(3)	8.3(3)	1.1(3)	1.7(3)	-3.6(2)
C(24)	0.8413(6)	-0.2955(5)	0.4774 (2)	11.9(4)	6.9(3)	6.8(2)	0.4(2)	1.6(2)	-2.2(2)

Atom	x	y	z	$U_{11} \cdot 10^2$ oder $U \cdot 10^2$
H (07)	0.609(5)	0.295(5)	0.520(1)	12. (1)
H (14)	0.547(4)	0.055(4)	0.687(1)	7. (1)
H (15)	0.611(5)	0.013(5)	0.771(1)	12. (1)
H (16)	0.853(4)	0.171(4)	0.826(1)	9. (1)
H (17)	0.996(5)	0.363(5)	0.786(1)	12. (1)
H (18)	0.927(5)	0.404(5)	0.695(1)	11. (1)
H (20)	0.743(5)	0.086(5)	0.437(1)	9. (1)
H (21)	0.772(4)	-0.041(5)	0.359(1)	8. (1)
H (22)	0.866(4)	-0.306(5)	0.354(1)	9. (1)
H (23)	0.911(5)	-0.472(6)	0.434(2)	11. (2)
H (24)	0.865(6)	-0.359(6)	0.505(2)	12. (2)
H(121)	0.510(7)	0.730(6)	0.654(2)	15. (2)
H(122)	0.519(6)	0.715(6)	0.594(2)	14. (2)
H(123)	0.382(8)	0.675(8)	0.636(2)	21. (3)

Tabelle B 2: Beobachtete und berechnete Strukturfaktoren der Vulpinsäure

	-9,0,L	
2	13*	12
4	55	54
6	34	-24
8	41	37
10	40	-27
12	35	-31
14	13*	-4
16	22	1
18	14*	3

	-8,0,L	
2	78	-73
4	13*	-5
6	13*	-21
8	38	-37
10	70	62
12	68	63
14	23	-5
16	13*	-3
18	13*	8
20	77	48
22	14*	7

	-7,0,L	
2	12*	-16
4	65	-63
6	12*	-18
8	104	-89
10	65	-64
12	104	106
14	68	65
16	50	-44
18	100	-97
20	13*	9
22	130	119
24	28	27
26	56	-57

	-6,0,L	
2	74	72
4	66	66
6	83	89
8	156	150
10	83	85
12	98	-93
14	29	30
16	93	96
18	13*	15
20	93	-89
22	128	-129
24	212	200
26	32	37
28	14*	-4

	-5,0,L	
2	81	75
4	121	-114
6	92	91
8	93	-90
10	90	89
12	161	-170
14	12*	9
16	74	72
18	115	112
20	136	138
22	213	-211
24	155	-153
26	50	46
28	92	84
30	20	8

	-4,0,L	
2	50	-43
4	196	-191
6	36	22
8	42	-41
10	283	-262
12	486	-486
14	312	-311
16	14*	-9
18	19	-18
20	209	-203
22	83	85
24	72	-66
26	13*	-17
28	36	-46
30	19	-8

	-3,0,L	
2	512	-524
4	183	190
6	299	294
8	175	171
10	55	53
12	479	475
14	11*	11
16	124	-123
18	66	64
20	66	67
22	19	28
24	12*	-7
26	42	44
28	71	70
30	55	52

	-2,0,L	
2	352	366
4	101	-103
6	265	284
8	226	219
10	10*	-4
12	85	87
14	139	139
16	53	52
18	88	79
20	293	292
22	314	313
24	12*	-2
26	110	-103
28	115	-112
30	65	60

	-1,0,L	
2	851	-878
4	296	298
6	297	-319
8	202	-200
10	349	362
12	226	-208
14	67	51
16	347	-344
18	146	146
20	29	26
22	52	55
24	92	-101
26	27	-27
28	70	-63
30	22	-20

	.0,0,L	
6	761	-783
8	539	563
10	564	574
12	320	-317
14	14*	18
16	124	127
18	74	72
20	23	-28
22	98	-105
24	26	-17
26	38	-45
28	58	61
30	13*	4
	1,0,L	
0	53	-65
2	689	694
4	265	291
6	644	-651
8	234	-249
10	253	240
12	438	418
14	253	-251
16	213	-210
18	203	-201
20	313	-321
22	210	-212
24	59	61
26	63	62
28	28	20
30	63	-55
	2,0,L	
0	1251	-1287
2	1101	-1115
4	335	-350
6	188	-201
8	312	-304
10	489	-474
12	156	164
14	328	324
16	11*	-23
18	83	-69
20	22	-12
22	12*	-6
24	28	-24
26	19	19
28	13*	-6
	3,0,L	
0	575	-617
2	61	62
4	419	432
6	154	157
8	127	-124
10	111	-116
12	33	36
14	38	-37
16	189	194
18	72	-72
20	278	268
22	235	234
24	109	112
26	57	8
28	33	-34
	4,0,L	
0	212	-219
2	175	171
4	71	-68
6	136	139
8	114	-126
10	92	-87
12	134	139
14	142	-147
16	26	27
18	80	-80
20	13*	3
22	13*	2
24	13*	-1
26	14*	-9
	5,0,L	
0	135	131
2	272	269
4	21	14
6	57	60
8	143	144
10	75	68
12	12*	-6
14	56	55
16	48	-45
18	64	29
20	71	-68
22	87	-85
	6,0,L	
0	18	16
2	103	-99
4	12*	-7
6	12*	-2
8	72	65
10	82	75
12	54	-57
14	54	50
16	21	11
18	20	19
20	20	-19
	7,0,L	
0	19	10
2	63	-57
4	50	-57
6	56	-52
8	46	-43
10	37	-30
12	67	-63
14	38	-39
16	13*	-5
	8,0,L	
0	25	-28
2	36	35
4	51	48
6	13*	13
8	60	-56
10	13*	-6
	9,0,L	
0	13*	-11
2	13*	-3
4	21	7
	-9,1,L	
1	13*	-3
2	13*	14
3	13*	2

-9,1,L

4	13*	-15
5	13*	-10
6	13*	-15
7	13*	-0
8	13*	5
9	23	-19
10	33	-29
11	13*	3
12	13*	13
13	25	21
14	13*	7
15	21	23
16	29	-20
17	13*	2

-8,1,L

1	13*	17
2	13*	-13
3	42	41
4	34	34
5	13*	12
6	37	-36
7	13*	14
8	64	60
9	13*	16
10	24	32
11	21	-17
12	22	14
13	26	-19
14	23	27
15	32	-28
16	23	29
17	31	20
18	45	42
19	13*	10
20	13*	-0
21	46	-45
22	39	-31
23	14*	-2

-7,1,L

1	125	116
2	55	-53
3	12*	18
4	12*	-3
5	28	29
6	12*	-14
7	33	-26
8	12*	7
9	27	15
10	12*	16
11	59	-56
12	35	28
13	12*	-22
14	21	-27
15	13*	17
16	27	23
17	21	16
18	58	17
19	33	30
20	39	35
21	21	-11
22	40	43
23	85	-76
24	63	-58
25	46	-46
26	14*	19
27	14*	-15

-6,1,L

1	31	-35
2	22	-27
3	48	-40
4	22	-25
5	11*	-13
6	18	10
7	21	-19
8	12*	16
9	34	26
10	165	-158
11	51	52
12	88	-83
13	83	-85
14	115	-112
15	42	-39
16	24	-20
17	12*	18
18	34	-26
19	29	-21
20	97	-92
21	34	-29
22	13*	1
23	35	-29
24	13*	13
25	39	33
26	33	-28
27	13*	-2
28	26	-15
29	22	-0

-5,1,L

1	183	-170
2	62	-62
3	117	-114
4	71	57
5	17	-16
6	145	137
7	52	-55
8	176	169
9	103	-94
10	25	26
11	103	104
12	101	-90
13	211	202
14	25	29
15	30	-28
16	47	41
17	187	-185
18	23	20
19	19	16
20	41	35
21	65	66
22	113	-108
23	45	44
24	92	89
25	58	-58
26	21	-22
27	13*	12
28	34	31
29	25	26
30	36	27

-4,1,L

1	217	-210
2	179	-164
3	33	43
4	54	-51
5	255	244
6	82	-87
7	151	143
8	225	-220
9	138	135

-4,1,L

10	197	194
11	101	-103
12	11*	-4
13	11*	-11
14	11*	-1
15	106	105
16	37	-39
17	21	18
18	41	39
19	125	-121
20	259	245
21	92	89
22	12*	-0
23	200	190
24	44	-46
25	122	116
26	54	-54
27	92	-85
28	13*	-1
29	46	-45
30	24	15

-3,1,L

1	202	-189
2	173	-169
3	184	-188
4	217	-221
5	318	-314
6	33	-37
7	176	174
8	127	-121
9	124	-114
10	59	55
11	44	-42
12	111	111
13	33	-34
14	11*	4
15	108	-98
16	107	-113
17	236	228
18	145	-143
19	44	42
20	63	64
21	24	-21
22	205	204
23	162	-165
24	13*	-2
25	13*	21
26	115	-111
27	69	69
28	22	-25
29	13*	-14
30	19	-18

-2,1,L

1	1175	1166
2	1698	1727
3	838	842
4	196	-199
5	607	-603
6	300	-288
16	83	84
17	49	54
18	58	64
19	73	70
20	11*	7
21	61	-57
22	24	-22
23	12*	-9
24	54	53
25	97	-97
26	33	37
27	13*	-5
28	13*	13
29	13*	0
30	19	-5

-1,1,L

1	224	-215
2	1003	959
3	118	110
4	402	-390
5	852	835
6	9*	-21
7	239	-226
8	286	-298
9	30	32
10	301	-286
11	563	550
12	146	145
13	174	165
14	37	29
15	51	-49
16	158	-149
17	135	-123
18	184	-184
19	46	-52
20	174	-182
21	167	-167
22	110	-117
23	102	-95
24	71	-77
25	64	67
26	59	60
27	63	61
28	49	-52
29	32	25
30	34	-26

0,1,L

1	492	-454
2	639	-598
3	426	-424
4	207	-218
5	51	-45
6	261	-262
7	11*	-13
8	368	-368
9	222	-220
10	201	-189
11	245	-248
12	443	-420
13	324	316
14	211	207
15	183	170
16	13*	-20
17	30	29
18	82	-87
19	65	78
20	203	-191
21	132	139
22	56	-47
23	13*	8
24	13*	-17
25	112	-109
26	61	61
27	54	-55
28	27	-18
29	32	25
30	13*	-11

.1,1,L

1	875	-846
2	745	-730
3	265	270
4	514	499
5	283	282
6	381	392
7	137	-144
8	316	-298
9	54	-50
10	24	-21
11	67	25
12	78	-73
13	164	-153
14	218	214
15	11*	15
16	80	81
17	85	-96
18	36	33
19	130	127
20	12*	15
21	86	83
22	156	162
23	182	186
24	132	149
25	13*	16
26	31	33
27	30	-36
28	13*	30
29	13*	-11
30	13*	16

2,1,L

0	1189	-1210
1	997	1000
2	276	-281
3	629	-642
4	382	386
5	243	-242
6	134	-127
7	119	115
8	254	-252
9	26	-27
10	182	-176
11	11*	-17
12	71	67
13	74	-65
14	98	99
15	30	28
16	136	-134
17	11*	-14
18	70	70
19	64	-63
20	60	-56
21	34	-37
22	68	33
23	49	-55
24	26	21
25	13*	8
26	24	-24
27	26	30
28	13*	10
29	13*	-0

3,1,L

0	69	-61
1	395	385
2	194	-194
3	218	214
4	399	385
14	129	124
15	120	-113
16	12*	9
17	29	32
18	101	103
19	166	-159
20	69	68
21	90	-90
22	13*	-11
23	56	-56
24	54	-53
25	13*	15
26	29	-25
27	23	3

4,1,L

0	398	401
1	450	-453
2	135	133
3	133	-137
4	11*	4
5	18	11
6	69	64
7	11*	-6
8	199	192
9	19	-17
10	130	118
11	80	81
12	21	-25
13	93	87
14	145	-135
15	53	52
16	119	115
17	12*	13
18	67	-34
19	23	23
20	37	32
21	28	-28
22	34	-26
23	22	-17
24	28	-27
25	33	29

5,1,L

0	19	13
1	20	17
2	51	52
3	40	31
4	179	-166
5	31	25
6	25	-28
7	51	-55
8	21	-28
9	82	-81
10	70	-65
11	72	-71
12	12*	13
13	42	-45
14	160	-155
15	13*	-8
16	13*	19
17	13*	14
18	55	-49
19	64	59
20	55	-54
21	98	95
22	61	-53
23	72	38

6,1,L

0	104	-103
1	27	-18
2	12*	-6

6,1,L

3	113	118
4	56	-3
5	92	85
6	29	28
7	39	-30
8	12*	-11
9	29	-30
10	61	-62
11	27	-25
12	29	29
13	46	40
14	52	50
15	32	-33
16	13*	11
17	13*	-8
18	13*	2
19	13*	-6
20	13*	12

7,1,L

0	37	-43
1	44	35
2	72	-63
3	12*	-11
4	61	-10
5	12*	14
6	12*	-1
7	45	44
8	13*	9
9	32	30
10	31	-27
11	21	-9
12	38	-32
13	27	6
14	27	31
15	34	29
16	34	31

8,1,L

0	26	29
1	19	5
2	25	12
3	28	-30
4	13*	10
5	38	-33
6	13*	-15
7	21	20
8	13*	6
9	28	23
10	30	31
11	13*	16

9,1,L

0	13*	9
1	23	-14
2	19	21
3	13*	-15
4	13*	15

-9,2,L

1	14*	19
2	13*	10
3	13*	2
4	14*	-7
5	13*	-4
6	27	26
7	13*	-10
8	13*	-13
9	19	8
10	13*	-7
11	32	18
12	30	-12
13	14*	-7
14	22	-4
15	14*	7
16	14*	7

-8,2,L

1	43	38
2	25	-10
3	45	40
4	50	-48
5	21	-19
6	13*	7
7	28	27
8	13*	11
9	36	-36
10	13*	10
11	36	-30
12	13*	7
13	59	-57
14	58	9
15	51	-48
16	13*	-16
17	13*	0
18	13*	10
19	20	-20
20	39	-31
21	23	-8
22	44	-36

-7,2,L

1	64	-55
2	13*	-12
3	12*	10
4	28	32
5	12*	-14
6	12*	-5
7	34	24
8	30	32
9	23	22
10	12*	-4
11	35	-27
12	12*	20
13	12*	15
14	80	77
15	49	-49
16	12*	3
17	47	-39
18	23	-6
19	44	-37
20	41	39
21	69	-64
22	71	66
23	13*	-1
24	13*	5
25	30	-30
26	19	11

-6,2,L

1	146	-147
2	137	-141
3	115	-116
4	61	59
5	63	63
6	11*	-4
7	17	-7
8	23	-21
9	32	36
10	24	-23

-6,2,L

11	11*	21
12	11*	-8
13	61	64
14	72	-68
15	65	68
16	12*	-6
17	22	25
18	29	-29
19	36	28
20	12*	-6
21	46	42
22	77	73
23	12*	21
24	12*	11
25	40	43
26	13*	16
27	23	-24
28	21	-16

-5,2,L

1	62	-53
2	81	83
3	199	-195
4	203	-203
5	97	-101
6	80	-85
7	18	-17
8	19	-7
9	11*	10
10	78	-80
11	37	36
12	11*	12
13	33	-38
14	28	-25
15	11*	7
16	20	18
17	11*	-12
18	36	37
19	40	38
20	30	-29
21	90	87
22	12*	-14
23	67	70
24	68	-65
25	12*	11
26	30	-33
27	12*	9
28	13*	-10
29	20	6
30	13*	4

-4,2,L

1	516	529
2	602	614
3	279	289
4	235	252
5	111	106
6	224	-229
7	257	-259
8	146	132
9	44	35
10	287	280
11	11*	12
12	114	114
13	34	-38
14	21	-27
15	40	-41
16	50	-49
17	80	-79
18	105	108
19	81	85
20	11*	8
21	59	-60
22	26	-33
23	24	26
24	41	43
25	25	-29
26	41	35
27	12*	-14
28	12*	5
29	22	12
30	13*	9

-3,2,L

1	187	182
2	479	-492
3	66	61
4	245	243
5	505	516
6	203	-197
7	212	221
8	260	-256
9	36	34
10	98	89
11	212	-202
12	269	270
13	61	68
14	145	138
15	136	140
16	222	-217
17	97	91
18	207	-203
19	154	-149
20	20	23
21	87	-95
22	147	-155
23	118	-123
24	53	-52
25	40	39
26	12*	10
27	12*	-6
28	36	39
29	13*	24
30	30	-29

-2,2,L

1	375	-391

-2,1,L

8	265	277
9	20	6
10	583	585
11	310	-312
12	538	540
13	413	-405
14	99	-91
15	10*	18

-2,2,L

9	96	-95
10	378	-374
11	102	-103
12	203	-197
13	46	-35
14	102	107
15	117	-119
16	177	173
17	283	288
18	222	-229
19	29	27
20	36	-25

-2,2,L

21	11*	-13
22	177	192
23	181	-189
24	91	96
25	76	-79
26	96	-96
27	12*	12
28	45	-38
29	12*	-1
30	32	-36

-1,2,L

1	503	-499
2	35	34
3	229	243
4	75	-63
5	10*	-3
11	93	100
12	77	-64
13	117	111
14	29	-22
15	39	-47
16	228	225
17	177	-183
18	157	157
19	22	19
20	120	-135
21	211	217
22	12*	-9
23	148	161
24	178	184
25	12*	4
26	116	117
27	13*	-22
28	12*	3
29	12*	-1
30	13*	-9

0,2,L

0	288	-281
1	299	287
2	202	192
3	214	-221
4	246	-250
5	238	-241
6	246	-249
7	10*	-10
8	307	-290
9	180	188
10	687	-687
11	321	324
12	285	-293
13	124	114
14	10*	-16
15	37	-34
16	105	106
17	21	-21
18	28	-28
19	102	-113
20	39	49
21	12*	22
22	141	-149
23	13*	23
24	91	-99
25	76	79
26	12*	-13
27	12*	6
28	20	13
29	12*	7
30	31	27

1,2,L

0	593	-586
1	324	-320
2	295	304
3	22	-24
4	181	179
5	163	-158
6	324	312
7	22	17
8	279	269
9	140	137
10	471	481
11	123	-118
12	72	68
13	26	26
14	61	-67
15	79	-76
16	120	131
17	59	-57
18	21	-21
19	24	21
20	11*	3
21	80	-90
22	56	-55
23	12*	-14
24	17	-15
25	28	-33
26	30	38
27	21	-22
28	13*	6
29	22	-18
30	13*	9

2,2,L

0	47	-47
1	161	-161
2	237	-240
3	122	-128
4	163	-157
5	97	71
6	261	261
7	46	-50
8	10*	-8
9	164	156
10	330	324
11	18	-14
12	179	170
13	139	-142
14	103	105
15	116	120
16	11*	2
17	79	-87
18	148	160
19	62	68
20	50	48
21	114	-117
22	12*	21
23	35	33
24	66	-67
25	24	18
26	12*	-3
27	30	26
28	49	42
29	13*	2

3,2,L

0	90	-84
1	172	169
2	10*	-5
3	33	-36
4	30	28

3,2,L

5	100	99
6	130	-122
7	37	-43
8	55	-24
9	149	-150
10	87	-86
11	25	-27
12	182	-183
13	66	-74
14	116	-114
15	11*	-5
16	168	-173
17	11*	-0
18	71	70
19	21	-19
20	18	19
21	12*	20
22	35	36
23	12*	14
24	12*	-7
25	12*	-0
26	58	-57
27	13*	19

4,2,L

0	216	233
1	138	-143
2	213	-215
3	190	190
4	77	70
5	90	92
6	102	109
7	52	5
8	87	89
9	108	-110
10	85	-83
11	11*	0
12	72	-77
13	108	107
14	77	77
15	25	24
16	31	-33
17	31	31
18	12*	-10
19	12*	-9
20	12*	-18
21	30	31
22	22	-0
23	22	19
24	12*	1
25	13*	-10

5,2,L

0	297	315
1	11*	-4
2	11*	-13
3	36	-30
4	147	-152
5	38	36
6	60	-62
7	62	57
8	97	95
9	11*	-4
10	53	54
11	19	-6
12	87	-87
13	32	-32
14	12*	-17
15	68	68
16	49	45
17	65	59
18	12*	-11
19	71	72
20	59	-53
21	30	27
22	13*	-9

6,2,L

0	102	-103
1	138	146
2	40	-41
3	32	-27
4	29	-27
5	46	-41
6	42	-44
7	22	24
8	44	-45
9	62	61
10	40	50
11	18	16
12	83	82
13	55	-57
14	46	-42
15	77	-74
16	13*	-10
17	13*	-15
18	12*	-6
19	24	-12

7,2,L

0	39	-45
1	12*	4
2	37	27
3	12*	1
4	21	13
5	12*	-2
6	12*	18
7	12*	-9
8	19	6
9	44	45
10	23	-29
11	12*	-4
12	46	47
13	31	31
14	13*	15
15	27	-30

8,2,L

0	19	-16
1	53	-55
2	12*	23
3	29	-29
4	24	23
5	12*	-10
6	31	-27
7	32	-24
8	13*	-5
9	13*	-15
10	19	-8

9,2,L

0	34	25
1	13*	-19
2	23	5

-9,3,L

1	26	-24
2	13*	6
3	25	-22
4	31	33

-9,3,L

5	13*	7
6	13*	-2
7	32	23
8	23	-23
9	22	16
10	13*	12
11	34	-26
12	38	38

-8,3,L

1	26	-31
2	78	-81
3	46	-51
4	13*	-18
5	13*	-17
6	46	49
7	13*	-1
8	19	-16
9	12*	7
10	18	-20
11	20	5
12	36	31
13	63	-61
14	63	64
15	23	-19
16	30	32
17	13*	12
18	13*	-25
19	37	33
20	13*	-15

-7,3,L

1	39	40
2	61	74
3	12*	7
4	103	-102
5	82	-85
6	65	-63
7	12*	-3
8	12*	-6
9	50	-46
10	52	49
11	36	-31
12	19	13
13	29	-21
14	12*	-3
15	22	-19
16	12*	-4
17	12*	6
18	48	53
19	26	-25
20	27	30
21	13*	20
22	13*	4
23	13*	23
24	13*	5

-6,3,L

1	12*	-23
2	212	214
3	178	181
4	181	183
5	12*	2
6	57	-52
7	29	-21
8	24	-31
9	22	20
10	12*	-17
11	117	110
12	20	-3
13	98	100
14	27	-24
15	26	-30
16	72	-69
17	12*	4
18	12*	2
19	12*	-10
20	23	23
21	33	-36
22	12*	13
23	13*	-4
24	13*	-3
25	13*	-2
26	36	35
27	56	17

-5,3,L

1	61	-60
2	132	-131
3	11*	4
4	45	49
5	56	63
6	101	103
7	92	97
8	31	28
9	41	-45
10	11*	-11
11	34	31
12	86	-84
13	154	155
14	55	-55
15	123	126
16	11*	14
17	11*	7
18	117	-112
19	23	24
20	106	-107
21	37	41
22	116	-122
23	27	-27
24	45	-51
25	42	-40
26	13*	7
27	13*	-0
28	30	34
29	13*	-0

-4,3,L

1	27	24
2	11*	-10
3	11*	-22
4	161	-162
5	21	26
6	160	169
7	62	-56
8	55	-62
9	10*	-4
10	47	-51
11	105	-106
12	11*	12
13	194	-196
14	27	33
15	39	-39
16	115	120
17	48	-50
18	101	99
19	11*	1
20	22	-22
21	12*	10
22	37	43
23	50	53

-4,3,L

24	12*	-15
25	45	-46
26	12*	-20
27	32	-34
28	55	-56
29	13*	-12
30	13*	1

-3,3,L

1	296	303
2	143	-133
3	289	-295
4	142	150
5	184	193
6	10*	16
7	84	-90
8	106	117
9	11*	10
10	150	-146
11	71	-64
12	50	-52
13	10*	-21
14	113	113
15	52	57
16	53	-58
17	45	-44
18	110	112
19	35	34
20	38	43
21	122	-132
22	126	132

-2,2,L

2	89	-94
3	83	91
4	191	197
5	691	-701
6	371	363
7	10*	2
8	178	-166

-2,3,L

1	333	343
2	315	-325
3	10*	-27
4	177	180
5	68	-70
6	273	-284
7	109	-105
8	234	-229
9	154	150
10	146	-150
11	115	-110
12	141	-140
13	58	-62
14	10*	3
15	41	43
16	11*	6
17	23	23
18	108	-110
19	11*	20
20	33	42
21	34	-36
22	82	-82
23	12*	-3
24	50	-49
25	12*	11
26	38	-32
27	12*	12
28	28	18
29	24	16
30	29	29

-1,3,L

1	534	-525
2	262	243
3	238	-223
4	100	97
5	247	-245
6	479	458
7	188	-178
8	197	180
9	279	265
10	25	17
11	331	319
12	18	11
13	61	52
14	46	29
15	257	-255
16	168	171
17	32	-27
18	21	22
19	17	-22
20	108	-115
21	11*	-14
22	12*	-2
23	55	-58
24	51	-57
25	32	35
26	12*	9
27	29	34
28	13*	15
21	57	-14
22	12*	-2
23	58	-58
24	56	-57
25	28	35
26	12*	9
27	32	34
28	12*	15
29	32	-32
30	13*	-16

0,3,L

1	42	-41
2	330	-305
3	176	166
4	419	-395
5	152	148
6	239	-228
7	81	82
8	364	346
9	202	-196
10	205	204
11	98	86
12	11*	9
13	240	241
14	29	-36
15	12*	15
16	49	47
17	35	-37
18	264	267
19	45	-51
20	62	-76
21	246	256
22	120	-133
23	36	42
24	58	-61
25	20	-7
26	31	22
27	21	-21
28	61	59

0,3,L

29	13*	-1
30	21	8

1,3,L

0	174	-154
1	189	-181
2	92	-85
3	260	250
4	66	65
5	24	38
6	247	-228
7	177	183
8	56	-56
9	221	-202
10	28	-24
11	177	-168
12	10*	20
13	126	-123
14	227	-230
15	11*	-21
16	196	-199
17	98	100
18	103	-104
19	145	-140
20	222	228
21	12*	-1
22	12*	-3
23	38	38
24	29	-10
25	62	59
26	59	-55
27	34	-36
28	13*	-15
29	31	-21

2,3,L

0	236	-236
1	157	-147
2	76	-55
3	63	-61
4	62	-65
5	65	65
6	331	309
7	25	14
8	213	219
9	187	-176
10	135	142
11	284	-292
12	73	79
13	61	62
14	22	28
15	100	105
16	77	79
17	48	52
18	121	-122
19	31	42
20	43	44
21	86	-83
22	101	90
23	73	-72
24	52	49
25	29	-27
26	13*	3
27	13*	-4
28	26	-18

3,3,L

0	317	314
1	285	284
2	74	66
3	82	87
4	255	-253
5	68	-38
6	66	-64
7	11*	2
8	40	-38
9	285	288
10	81	82
11	21	24
12	100	-100
13	105	-103
14	93	-94
15	54	51
16	12*	11
17	49	48
18	91	93
19	86	83
20	12*	0
21	32	-19
22	12*	-9
23	12*	-1
24	55	-12
25	13*	-5
26	57	-22

4,3,L

0	123	120
1	71	-71
2	70	63
3	46	-51
4	59	-63
5	42	-41
6	44	-44
7	43	-39
8	64	-71
9	44	53
10	20	-29
11	176	178
12	12*	17
13	37	35
14	56	-57
15	81	-76
16	94	-97
17	57	-54
18	64	-62
19	25	20
20	12*	-8
21	12*	-10
22	13*	-22
23	13*	-2
24	13*	4

5,3,L

0	17	20
1	46	42
2	69	68
3	33	35
4	57	49
5	20	-21
6	11*	-5
7	17	18
8	11*	22
9	11*	-19
10	11*	-0
11	12*	10
12	41	41
13	12*	2
14	84	85
15	12*	6
16	12*	-1
17	27	-27
18	27	-32

5,3,L

19	12*	7
20	29	-30
21	13*	3

6,3,L

0	72	-77
1	60	-56
2	35	-32
3	27	-29
4	32	35
5	22	21
6	57	-61
7	20	-2
8	76	-74
9	74	-72
10	33	31
11	12*	-18
12	12*	2
13	24	-33
14	52	52
15	20	16
16	13*	8
17	30	-16
18	20	16

7,3,L

0	29	-26
1	38	37
2	12*	0
3	37	-41
4	55	14
5	42	-35
6	12*	-2
7	13*	-15
8	67	-62
9	29	-28
10	24	-27
11	13*	-17
12	20	10
13	13*	-13
14	13*	-2

8,3,L

0	57	56
1	19	16
2	23	37
3	13*	19
4	13*	8
5	13*	10
6	23	26
7	13*	-4
8	46	46

-8,4,L

1	19	21
2	38	39
3	27	16
4	93	99
5	13*	24
6	13*	16
7	13*	8
8	39	-41
9	13*	-12
10	33	25
11	35	-38
12	75	78
13	25	-28
14	61	28
15	13*	6
16	13*	-15
17	13*	-10
18	25	-29

-7,4,L

1	22	26
2	72	-76
3	12*	0
4	25	-29
5	12*	17
6	102	103
7	12*	-16
8	41	41
9	54	53
10	57	-56
11	65	65
12	67	-65
13	13*	19
14	12*	7
15	20	22
16	36	34
17	12*	-7
18	12*	-12
19	13*	1
20	31	-25
21	22	-14
22	24	-21

-6,4,L

1	47	-44
2	12*	19
3	12*	-11
4	77	-89
5	31	29
6	24	-19
7	27	-24
8	76	82
9	61	-62
10	12*	-7
11	37	37
12	102	-107
13	99	100
14	122	-126
15	18	16
16	12*	13
17	29	-26
18	97	100
19	48	-47
20	12*	3
21	49	46
22	12*	-0
23	13*	8
24	38	36
25	31	-29

-5,4,L

1	38	-43
2	39	-40
3	64	63
4	57	60
5	127	-126
6	38	-36
7	101	100
8	20	-6
9	20	25
10	136	-132
11	48	39
12	60	-62
13	22	16
14	27	23
15	26	-28

-5,4,L

16	18	-17
17	50	57
18	12*	3
19	12*	-2
20	26	32
21	12*	12
22	12*	10
23	12*	12
24	13*	16
25	26	31
26	34	36
27	22	26

-4,4,L

1	62	60
2	37	-39
3	163	164
4	12*	-12
5	79	-84
6	11*	12
7	29	-22
8	37	-39
9	114	-114
10	103	110
11	97	-102
12	11*	6
13	97	-93
14	12*	-2
15	58	-51
16	79	85
17	40	-34
18	65	-66
19	24	25
20	28	-27
21	12*	12
22	28	-32
23	12*	-5
24	30	-13
25	12*	-10
26	30	-28
27	13*	8
28	20	18

-3,4,L

1	11*	7
2	10*	9
3	119	-118
4	115	-122
5	46	57
6	112	111
7	51	48
8	62	-41
9	52	53
10	157	161
11	41	-44
12	310	311
13	166	-177
14	117	112
15	55	-57
16	23	15
17	36	-36
18	85	92
19	109	-110
20	43	44
21	80	-95
22	12*	-2
23	55	-64
24	30	-39
25	38	36
26	12*	-12
27	28	30
28	22	22
29	19	-25

-2,4,L

1	67	-63
2	85	80
3	106	-112
4	18	-19
5	20	16
6	175	-169
7	10*	-6
8	97	98
9	22	-17
10	10*	-0
11	117	116
12	118	-119
13	149	155
14	11*	-18
15	151	159
16	143	-147
17	91	97
18	11*	-11
19	95	100
20	73	70

-3,3,L

23	12*	11
24	109	122
25	22	33
26	74	79
27	20	10
28	12*	-4
29	20	14
30	19	3

-2,4,L

29	20	23

-1,4,L

1	281	-269
2	246	-232
3	45	45
4	33	20
5	207	200
6	24	20
7	148	-145
8	111	-103
9	51	-55
10	34	32
11	90	-84
12	107	-99
13	11*	1
14	143	-151
15	35	41
16	80	-90
17	136	-139
18	147	-153
19	140	149
20	44	-40
21	12*	24
22	48	-51
23	139	148
24	12*	-15
25	12*	-2
26	12*	12
27	13*	-13
28	33	-31
29	13*	-17

0,4,L

1	10*	7
2	38	39
3	300	-285
4	336	-309
5	122	109
6	213	191
7	49	-52
8	265	262
9	90	86
10	76	-75
11	76	-74
12	56	-54
13	19	22
14	39	43
15	65	66
16	163	170
17	12*	1
18	96	95
19	39	-37
20	75	-68
21	19	-1
22	78	84
23	30	-34
24	13*	-25
25	21	-22
26	23	21
27	13*	-1
28	13*	-10
29	13*	11

1,4,L

0	59	-55
1	516	489
2	112	95
3	324	308
4	127	-122
5	10*	0
6	374	-363
7	49	49
8	145	141
9	51	59
10	274	274
11	76	72
12	11*	14
13	11*	-17
14	202	-204
15	65	-74
16	124	-122
17	95	101
18	180	184
19	12*	-12
20	40	45
21	54	57
22	22	13
23	53	-58
24	13*	21
25	26	-24
26	13*	6
27	13*	7
28	13*	-6

2,4,L

0	135	131
1	22	-24
2	74	79
3	165	-173
4	149	143
5	182	-183
6	82	-81
7	137	133
8	167	-165
9	11*	-7
10	11*	-11
11	11*	14
12	217	216
13	48	-44
14	55	64
15	22	-28
16	191	-192
17	12*	-7
18	149	-149
19	99	-100
20	108	101
21	79	-87
22	56	50
23	50	-54
24	12*	-13
25	25	15
26	31	-29

3,4,L

0	10*	1
1	80	86
2	181	184
3	59	59
4	230	231
5	29	-27
6	45	38
7	52	-52
8	16	-17
9	55	56
10	76	-71
11	34	26
12	11*	-4
13	11*	11
14	120	119
15	59	-52
16	88	84
17	19	23
18	84	-81
19	30	27
20	82	-77
21	39	31
22	43	33
23	29	-30
24	48	36
25	13*	23

4,4,L

0	43	-42
1	187	-194
2	119	-127
3	11*	-4
4	19	-24
5	80	78
6	30	-30
7	20	-30
8	183	-187
9	12*	7
10	106	-106
11	12*	-19
12	27	-27
13	75	76
14	12*	23
15	12*	0
16	49	49
17	18	-22
18	19	14
19	20	-11
20	37	-38
21	64	60
22	59	-52

5,4,L

1	50	-51
2	82	86
3	22	-25
4	60	-59
5	42	-41
6	12*	-10
7	82	-76
8	29	-31
9	74	-73
10	63	-63
11	50	-53
12	12*	9
13	12*	-18
14	12*	-8
15	12*	12
16	31	27
17	12*	4
18	13*	-5
19	13*	0
20	13*	19

6,4,L

0	31	-32
1	80	78
2	29	34
3	50	51
4	31	31
5	12*	11
6	20	26
7	32	32
8	82	87
9	12*	2
10	61	65
11	12*	7
12	19	30
13	13*	-6
14	12*	9
15	13*	-12
16	13*	8

7,4,L

0	12*	-15
1	12*	-16
2	12*	-19
3	29	12
4	18	6
5	12*	5
6	12*	13
7	31	28
8	12*	12
9	13*	26
10	30	37
11	13*	20
12	13*	-12

8,4,L

0	26	-19
1	19	-16
2	23	-21
3	26	-26
4	13*	4
5	13*	-3
6	21	22

-8,5,L

1	13*	-7
2	13*	1
3	31	-32
4	13*	7
5	13*	-26
6	13*	1
7	13*	-24
8	13*	12
9	28	-17
10	13*	19
11	13*	-2
12	13*	-6

-7,5,L

1	52	49
2	43	-47
3	36	32
4	27	-22
5	12*	-6
6	12*	1
7	13*	-4
8	34	-35
9	23	10
10	13*	-11
11	13*	7
12	52	-50
13	13*	20
14	23	-24
15	13*	11
16	21	10
17	19	-22
18	13*	1
19	13*	20

-6,5,L

1	47	47
2	40	-36
3	44	45
4	44	-40
5	46	52
6	54	53
7	87	-89
8	12*	-4
9	60	61
10	65	-74
11	74	77
12	61	-69
13	12*	21
14	24	-22
15	12*	-6
16	12*	18
17	40	-35
18	13*	13
19	13*	-14
20	13*	-6
21	39	-39
22	25	22
23	13*	-16

-5,5,L

1	65	-40
2	70	74
3	65	-73
4	61	-64
5	88	97
6	78	-79
7	30	25
8	127	134
9	103	-109
10	124	122
11	58	-59
12	102	96
13	20	29
14	12*	-2
15	12*	0

-5,5,L

16	12*	-1
17	12*	5
18	28	34
19	19	-26
20	13*	-15
21	13*	5
22	13*	-24
23	60	-60
24	13*	7
25	27	-31

-4,5,L

1	30	-34
2	56	61
3	48	49
4	97	107
5	108	-116
6	93	-107
7	139	149
8	107	-115
9	23	29
10	45	50
11	147	-152
12	186	196
13	119	-123
14	79	87
15	12*	0
16	87	-92
17	126	133
18	56	-61
19	20	16
20	42	43
21	12*	-0
22	36	33
23	71	64
24	67	-67
25	38	40
26	34	-34

-3,5,L

1	184	-194
2	114	-122
3	11*	4
4	31	-26
5	53	52
6	76	81
7	74	-80
8	37	33
9	158	-157
10	11*	-4
11	85	-81
12	11*	-5
13	11*	7
14	33	-27
15	11*	2
16	21	-23
17	48	-51
18	82	-85
19	12*	-1
20	35	-38
21	12*	8
22	51	54
23	13*	-21
24	13*	9
25	43	42
26	19	4
27	13*	-8

-2,5,L

1	54	65
2	16	28
3	123	-127
4	124	-125
5	95	-106
6	88	-91
7	169	156
8	17	17
9	128	130
10	58	-54
11	81	70
12	111	-110
13	11*	-10
14	103	-103
15	120	122
16	47	48
17	120	122
18	90	94
19	92	-91
20	33	32
21	34	33
22	30	-27
23	58	-50
24	54	46
25	12*	2
26	25	-23
27	13*	-13
28	29	17

-1,5,L

1	23	-22
2	147	149
3	199	193
4	52	53
5	107	-109
6	61	-53
7	65	-66
8	36	-36
9	122	125
10	11*	13
11	395	401
12	141	-136
13	154	156
14	99	-99
15	125	-125
16	134	-135
17	12*	9
18	12*	-18
19	142	158
20	55	59
21	38	38
22	41	-35
23	12*	13
24	46	45
25	51	-50
26	13*	-3
27	19	22

0,5,L

1	213	197
2	49	-51
3	63	-66
4	30	25
5	13*	-24
6	20	19
7	49	-37
8	40	-44
9	11*	-5
10	86	83
11	118	-113
12	104	106
13	56	-57
14	186	186

0,5,L

15	43	-48
16	84	89
17	236	-248
18	86	-86
19	12*	3
20	55	-56
21	50	-46
22	13*	-4
23	36	31
24	12*	-6
25	35	-38
26	13*	0
27	13*	-14

1,5,L

0	38	-31
1	63	58
2	177	179

-2,4,L

21	28	-26
22	22	25
23	50	43
24	12*	5
25	30	-30
26	42	-42
27	13*	-1
28	26	17

1,5,L

11	53	-49
12	132	135
13	86	-87
14	50	47
15	22	-21
16	93	96
17	22	-20
18	40	37
19	59	-65
20	12*	12
21	52	-55
22	53	55
23	13*	-10
24	13*	18
25	22	14
26	19	2

2,5,L

0	199	-209
1	112	-116
2	23	-29
3	149	-148
4	64	-62
5	24	20
6	20	-22
7	33	28
8	91	-96
9	134	-141
10	106	-110
11	119	-123
12	12*	15
13	55	56
14	12*	11
15	101	110
16	51	-41
17	68	68
18	28	-29
19	24	-6
20	34	-31
21	13*	-12
22	13*	-5
23	35	33
24	13*	-3
25	13*	1

3,5,L

0	61	63
1	16	-5
2	97	94
3	64	-63
4	66	63
5	111	-112
6	60	-60
7	50	-52
8	112	-109
9	54	-57
10	99	-106
11	40	-43
12	47	-52
13	94	-93
14	25	29
15	34	31
16	23	-31
17	40	50
18	29	-10
19	47	36
20	26	-19
21	13*	-2
22	13*	-10
23	13*	14

4,5,L

0	52	49
1	101	98
2	75	-70
3	91	92
4	38	44
5	24	27
6	51	46
7	12*	15
8	105	105
9	75	76
10	13*	28
11	126	122
12	56	-49
13	50	56
14	34	31
15	68	-64
16	49	42
17	19	-19
18	13*	7
19	22	22
20	52	-48

5,5,L

0	55	-58
1	47	-44
2	65	-71
3	36	43
4	35	-30
5	55	50
6	12*	15
7	12*	-9
8	47	48
9	19	32
10	61	63
11	13*	-0
12	13*	-5
13	49	45
14	34	-34

5,5,L

15	13*	8
16	22	20
17	13*	-17
18	69	59

6,5,L

0	34	-38
1	46	-41
2	29	-24
3	62	-61
4	12*	-5
5	13*	3
6	43	43
7	13*	-2
8	34	31
9	13*	-24
10	13*	1
11	30	-34
12	13*	12
13	31	-31
14	13*	-10

7,5,L

0	13*	21
1	25	27
2	20	2
3	13*	7
4	13*	-5
5	13*	-23
6	13*	-9
7	13*	8
8	13*	-9
9	13*	-6

8,5,L

0	13*	13

-7,6,L

1	31	30
2	20	-21
3	13*	10
4	13*	-7
4	13*	-7
5	19	-18
6	13*	11
7	13*	3
8	21	21
9	13*	-1
10	26	23
11	28	26
12	13*	-11
13	13*	15
14	13*	7

-6,6,L

1	19	14
2	27	-9
3	50	56
4	27	-21
5	45	45
6	13*	-1
7	13*	0
8	52	-50
9	13*	-2
10	21	23
11	28	-8
12	22	-6
13	19	17
14	13*	-4
15	13*	8
16	13*	-0
17	13*	-10
18	22	-23
19	20	28

-5,6,L

1	87	-87
2	13*	14
3	108	-108
4	23	19
5	27	35
6	30	39
7	13*	-18
8	13*	-1
9	13*	-21
10	35	-34
11	78	-80
12	19	17
13	50	-54
14	30	23
15	41	43
16	20	-22
17	13*	-15
18	24	-4
19	44	-43
20	13*	-0
21	27	-29
22	13*	5

-4,6,L

1	12*	-11
2	112	119
3	84	-87
4	52	-46
5	25	-23
6	114	-120
7	12*	11
8	55	59
9	38	-42
10	120	122
11	43	-48
12	12*	13
13	49	-53
14	48	-47
15	12*	-11
16	12*	8
17	89	88
18	21	20
19	62	55
20	13*	-6
21	13*	13
22	51	-46
23	13*	15
24	13*	-0

-3,6,L

1	44	57
2	37	35
3	12*	-2
4	96	99
5	88	-87
6	40	-37
7	76	80
8	217	-217
9	196	190
10	78	-77
11	95	89
12	111	113
13	72	72

-3,6,L

14	13*	18
15	67	-63
16	88	-91
17	38	-37
18	13*	-11
19	34	29
20	24	38
21	41	40
22	27	30
23	56	54
24	80	-77
25	13*	6

-2,6,L

1	84	84
2	70	-66
3	99	101
4	22	-14
5	47	-53
6	111	107
7	158	-161
8	132	131
9	75	78
10	173	-170
11	182	190
12	156	-164
13	75	78
14	50	47
15	39	-42
16	138	131
17	108	-103
18	13*	-14
19	54	-49
20	88	-90
21	13*	-14
22	71	64
22	70	64
23	79	-78
24	46	44
25	13*	-14

-1,6,L

1	23	-20
2	39	30
3	66	66
4	142	141
5	174	173
6	59	58
7	142	145
8	36	-37
9	57	-55
10	12*	-3
11	25	29
12	52	51
13	12*	4
14	12*	-10
15	12*	-6
16	33	37
17	12*	-4
18	25	32
19	49	-57
20	13*	-9
21	56	56
22	53	-54
23	25	-17
24	48	46
25	13*	3

0,6,L

0	84	-74
1	36	-30
2	59	-56
3	57	-57
4	48	-50
5	130	-121
6	57	59
7	49	-46
8	23	28
9	132	-131
10	51	-54
11	173	-164
12	13*	-15
13	78	-78
14	155	154
15	13*	-3
16	13*	22
17	81	77
18	33	-29
19	13*	12
20	31	-28
21	22	-23
22	36	-28
23	25	23
24	19	-8
25	25	17

1,6,L

0	11*	-3
1	17	21
2	62	-53
3	45	37
4	69	69
5	12*	10
6	106	-103
7	84	-82
8	35	-41
9	173	-179
10	101	90
11	191	-195
12	20	-21
13	105	-101
14	13*	-17
15	12*	-10
16	12*	1
17	13*	-23
18	49	38
19	13*	12
20	28	25
21	13*	-12
22	13*	-14
23	13*	1
24	13*	-11

2,6,L

0	103	98
2	33	34
3	60	59
4	31	-29
5	35	30
6	31	33
7	76	66
8	22	15
9	124	121
10	12*	10
11	122	119
12	13*	14
13	100	99
14	120	-115
15	92	89
16	38	-29
17	34	31
18	22	-27

2,6,L

19	13*	-15
20	34	34
21	13*	-11
22	13*	-12

3,6,L

0	180	-184
1	97	-98
2	18	13
3	40	-31
4	38	-35
5	27	37
6	48	48
7	12*	-7
8	41	40
9	49	46
10	26	-21
11	78	78
12	23	-18
13	52	53
14	56	-56
15	23	32
16	13*	-5
17	36	30
18	13*	5
19	42	45
20	13*	-11

4,6,L

0	12*	1
1	20	17
2	91	-97
3	66	-70
4	31	-35
5	30	-32
6	40	42
7	41	40
8	19	28
9	13*	15
10	13*	-12
11	13*	8
12	13*	-16
13	51	-51
14	45	45
15	59	-55
16	13*	17
17	46	-40
18	13*	11

5,6,L

0	66	63
1	64	69
2	12*	-13
3	45	45
4	23	-20
5	32	-23
6	13*	-7
7	21	-23
8	23	17
9	25	-16
10	13*	-4
11	13*	-12
12	23	-25
13	13*	-5
14	26	14
15	14*	-16

6,6,L

0	13*	7
1	13*	-13
2	21	19
3	27	-20
4	13*	6
5	13*	20
6	29	-27
7	13*	-19
8	13*	-0
9	21	-22
10	26	28

7,6,L

0	13*	0
1	13*	-5
2	19	9
3	27	-27
4	13*	9

-6,7,L

1	13*	-5
2	13*	4
3	13*	-7
4	13*	4
5	37	-40
6	21	-18
7	13*	-19

1,5,L

3	113	108
4	211	203
5	206	194
6	94	81
7	26	-24
8	61	-60
9	33	34
10	37	-34

-5,7,L

1	13*	-25
2	19	11
3	13*	-14
4	21	-12
5	23	20
6	13*	-19
7	13*	0
8	38	-45
9	13*	2
10	13*	1
11	13*	6
12	43	39
13	13*	25
14	31	33
15	13*	-4
16	13*	0
17	48	-47
18	37	-30

-4,7,L

1	13*	1
2	47	48
3	28	-30
4	56	60
5	13*	-19
6	13*	5
7	13*	13
8	13*	-5
9	37	32
10	13*	14
11	13*	14

-4,7,L		
12	13*	9
13	49	-48
14	32	28
15	13*	11
16	13*	21
17	14*	-19
18	41	30
19	44	-43
20	33	-21

-3,7,L		
1	77	80
2	51	-56
3	47	51
4	13*	-4
5	75	78
6	92	93
7	34	45
8	13*	26
9	22	-5
10	13*	-22
11	41	44
12	26	-21
13	46	41
14	36	37
15	13*	-17
16	13*	12
17	13*	17
18	42	-42
19	35	31
20	13*	-4
21	14*	-16
22	14*	-14

-2,7,L		
1	73	74
2	43	-46
3	12*	-10
4	19	-13
5	86	-84
6	13*	-2
7	13*	-6
8	43	-39
9	42	50
10	92	-91
11	69	-66
12	58	-58
13	13*	0
14	22	-10
15	13*	6
16	56	57
17	13*	16
18	48	47
19	13*	-15
20	22	-3
21	40	-36
22	20	23

-1,7,L		
1	41	-47
2	59	-59
3	98	102
4	12*	-19
5	23	-25
6	99	102
7	204	-209
8	109	107
9	127	-134
10	13*	-30
11	13*	-18
12	70	-77
13	33	-26
14	57	-58
15	25	-31
16	13*	-16
17	13*	-19
18	13*	0
19	13*	15
20	14*	12
21	20	-14
22	44	41

0,7,L		
1	45	-46
2	135	140
3	27	-21
4	47	-45
5	133	128
6	94	-97
7	85	80
8	45	41
9	67	-71
10	188	185
11	65	-59
12	114	110
13	14*	23
14	73	-68
15	97	91
16	43	-45
17	13*	19
18	13*	3
19	13*	-12
20	14*	-11
21	32	30
22	49	-48

1,7,L		
0	115	-117
1	57	-59
2	102	-102
3	71	-69
4	36	43
5	12*	-5
6	22	28
7	46	46
8	13*	-3
9	58	57
10	13*	-25
11	13*	14
12	24	20
13	13*	-6
14	38	38
15	19	-11
16	45	-45
17	51	52
18	33	32
19	13*	4
20	28	28
21	13*	-2

2,7,L		
0	111	112
1	12*	-12
2	107	-109
3	12*	-24
4	71	-76
5	34	-34
6	56	-58
7	51	57
8	12*	11
9	48	53

2,7,L

10	13*	-1
11	48	52
12	96	-95
13	58	57
14	13*	-8
15	19	-13
16	13*	6
17	41	-37
18	13*	7
19	13*	-10

3,7,L

0	116	113
1	43	43
2	65	63
3	13*	29
4	13*	-1
5	26	-31
6	13*	-6
7	21	-0
8	47	-48
9	39	48
10	50	-48
11	23	27
12	13*	-11
13	13*	-11
14	25	-27
15	24	22
16	14*	20
17	14*	11

4,7,L

0	53	-55
1	13*	14
2	26	29
3	34	-26
4	13*	8
5	24	-13
6	13*	11
7	41	-38
8	38	27
9	33	-31
10	13*	16
11	13*	-16
12	51	50
13	53	-49
14	37	26

5,7,L

0	23	-21
1	13*	3
2	13*	-8
3	13*	13
4	13*	-9
5	25	-16
6	13*	-3
7	24	6
8	13*	1
9	13*	-9
10	35	35

6,7,L

0	13*	9
1	13*	-17
2	27	22
3	28	27
4	13*	1
5	25	20

-5,8,L

1	13*	6
2	29	-22
3	14*	6
4	13*	7
5	22	19
6	21	27
7	14*	19
8	14*	15
9	14*	15
10	14*	-3
11	14*	0

-4,8,L

1	13*	4
2	25	-27
3	13*	2
4	13*	-24
5	13*	-5
6	22	-19
7	28	-21
8	13*	11
9	20	-24
10	13*	14
11	39	-41
12	24	1
13	39	-37
14	22	-23
15	25	29

-3,8,L

1	13*	22
2	13*	-1
3	13*	5
4	21	15
5	22	-21
6	19	22
7	26	-27
8	13*	-13
9	27	-31
10	13*	-12
11	13*	-3
12	24	-36
13	13*	-15
14	22	-31
15	14*	2
16	50	-45
17	23	-17

-2,8,L

1	30	37
2	13*	-20
3	51	51
4	13*	7
5	29	31
6	27	26
7	22	-20
8	29	27
9	13*	-2
10	21	7
11	60	55
12	21	-15
13	46	42
14	13*	-12
15	14*	19
16	14*	-24
17	14*	28
18	27	-20

-1,8,L

2	35	-33
3	62	-68
4	21	-14
5	13*	2
6	13*	-4
7	68	65
8	20	24
9	13*	-1
10	22	24
11	24	-29
12	13*	13
13	21	25
14	20	-13
15	13*	-15
16	13*	21
17	24	-11
18	26	25

0,8,L

0	109	104
1	40	-36
2	33	23
3	13*	1
4	91	-98
5	41	-45
6	27	-26
7	34	-37
8	13*	12
9	21	16
10	34	32
11	13*	-10
12	26	16
13	13*	-12
14	14*	10
15	22	15
16	14*	2
17	14*	-5
18	38	-25

1,8,L

0	28	30
1	63	65
2	114	117
3	20	-17
4	26	-25
5	102	96
6	105	-107
7	53	57
8	52	-62
9	13*	2
10	13*	19
11	28	-22
12	34	32
13	36	-39
14	23	-13
15	14*	13
16	14*	11
17	14*	6

2,8,L

0	71	-71
1	61	63
2	40	-36
3	31	-23
4	69	69
5	73	-75
6	26	23
7	13*	7
8	47	-47
9	70	69
10	60	-64
11	37	45
12	21	14
13	22	-10
14	43	40
15	58	-57

3,8,L

0	25	21
1	38	-31
2	13*	-18
3	48	41
4	13*	-6
5	13*	-14
6	27	19
7	55	-47
8	35	32
9	14*	-10
10	23	18
11	14*	15
12	35	-31

4,8,L

0	14*	2
1	14*	-14
2	14*	25
3	14*	-10
4	38	39
5	21	24
6	14*	19
7	14*	-2
8	22	13
9	32	-29

5,8,L

0	14*	-15
1	14*	12
2	14*	-11
3	20	-1

-3,9,L

1	29	-33
2	28	-25
3	30	-34
4	38	-37
5	14*	-2
6	14*	4
7	24	18
8	14*	18

-2,9,L

1	14*	20
2	14*	31
3	14*	-12
4	13*	-18
5	22	-21
6	44	-37
7	28	-21
8	27	-33
9	25	25
10	14*	-17
11	14*	19

-1,9,L

1	42	47
2	14*	25
3	24	27
4	14*	19

-1,9,L		
5	14*	19
6	14*	-23
7	13*	-2
8	20	-3
9	25	-23
10	14*	1
11	14*	5
12	14*	6

0,9,L		
1	49	-45
2	14*	14
3	13*	1
4	13*	4
5	14*	-13
6	31	-18
7	29	26
8	14*	-8
9	14*	-18
10	31	24
11	14*	-26

1,9,L		
0	39	-43
1	14*	2
2	13*	-0
3	14*	13
4	13*	6
5	14*	-7
6	14*	19
7	14*	-20
8	26	-12
9	27	30
10	14*	-4

2,9,L		
0	31	-30
1	14*	15
2	14*	5
3	14*	-22
4	14*	23
5	30	32
6	14*	16
7	14*	22
8	14*	-1

3,9,L		
0	25	-22
1	14*	15
2	20	-12
3	14*	-4
4	34	29

Tabelle B 3: Atomparameter und Temperaturfaktoren des Tridentochinons

Anisotroper Temperaturfaktor: $f_{t\ aniso} = \exp\left[-2\pi^2(U_{11}h^2a^{*2}+U_{22}k^2b^{*2}+U_{33}l^2c^{*2}+2U_{12}hka^*b^*+2U_{13}hla^*c^*+2U_{23}klb^*c^*)\right]$ Standardabweichungen in Klammern

Isotroper Temperaturfaktor: $f_{t\ iso} = \exp\left[-2\pi^2U(2\sin\theta/\lambda)^2\right]$

a) Molekül 1

Atom		x	y	z	$U_{11}\cdot10^2$	$U_{22}\cdot10^2$	$U_{33}\cdot10^2$	$U_{12}\cdot10^2$	$U_{13}\cdot10^2$	$U_{23}\cdot10^2$
O	1	0.77151(6)	0.5246(1)	0.1447(1)	6.0 (1)	6.1(1)	4.7(1)	2.11(9)	-0.85(9)	-0.9(1)
C	2	0.73856(8)	0.5116(2)	0.0398(2)	5.0 (1)	5.6(1)	5.1(2)	1.0 (1)	-1.2 (1)	-0.6(1)
C	3	0.75490(8)	0.4219(2)	-0.0271(2)	4.8 (1)	5.3(1)	3.8(1)	0.6 (1)	-0.3 (1)	0.5(1)
C	4	0.83765(8)	0.3449(2)	0.0043(2)	4.5 (1)	4.6(1)	3.5(1)	0.1 (1)	0.1 (1)	-0.0(1)
O	4	0.83662(6)	0.2882(1)	-0.0790(2)	5.33(9)	6.1(1)	5.0(1)	0.63(9)	-0.52(9)	-1.7(1)
C	5	0.87969(7)	0.3496(2)	0.0845(2)	4.1 (1)	4.5(1)	3.8(1)	0.4 (1)	0.1 (1)	0.0(1)
O	5	0.91330(6)	0.2911(1)	0.0567(2)	5.2 (1)	6.8(1)	5.7(1)	1.77(9)	-1.04(9)	-2.0(1)
C	6	0.88492(7)	0.4077(2)	0.1797(2)	4.2 (1)	4.4(1)	3.1(1)	-0.3 (1)	-0.1 (1)	0.5(1)
C	7	0.84777(8)	0.4726(2)	0.2057(2)	5.2 (1)	4.5(1)	3.4(1)	-0.0 (1)	0.1 (1)	-0.0(1)
O	7	0.84953(6)	0.5285(1)	0.2887(2)	7.1 (1)	7.0(1)	5.4(1)	1.3 (1)	-1.2 (1)	-2.5(1)
C	8	0.80664(8)	0.4674(2)	0.1240(2)	4.5 (1)	4.8(1)	3.7(1)	0.7 (1)	0.1 (1)	0.3(1)
C	9	0.80149(7)	0.4091(2)	0.0306(2)	4.1 (1)	4.7(1)	3.6(1)	0.2 (1)	-0.2 (1)	0.1(1)
C	10	0.72324(9)	0.3384(2)	-0.0185(3)	5.2 (1)	6.1(2)	5.3(2)	0.0 (1)	-1.1 (1)	0.7(1)
C	11	0.72033(9)	0.2909(2)	0.1073(3)	5.5 (1)	5.7(1)	5.7(2)	0.2 (1)	0.3 (1)	0.8(1)
C	12	0.75009(8)	0.2075(2)	0.1227(3)	4.6 (1)	4.5(1)	6.0(2)	-0.5 (1)	-0.1 (1)	0.2(1)
C	13	0.77834(9)	0.1994(2)	0.2165(2)	6.3 (2)	4.6(1)	5.2(2)	-0.0 (1)	-0.2 (1)	-0.2(1)
C	14	0.80742(10)	0.1182(2)	0.2503(3)	6.4 (2)	5.8(2)	7.5(2)	0.9 (1)	-1.1 (2)	-0.5(2)
C	15	0.79824(10)	0.0830(2)	0.3797(3)	6.8 (2)	6.1(2)	9.2(2)	-0.3 (1)	-1.6 (2)	2.3(2)
C	16	0.81632(9)	0.1376(2)	0.4864(3)	5.3 (1)	6.8(2)	5.8(2)	0.3 (1)	-0.3 (1)	2.3(2)
C	17	0.85132(10)	0.1941(2)	0.4784(3)	6.7 (2)	7.3(2)	5.1(2)	-0.8 (2)	0.3 (1)	1.1(2)
C	18	0.8745 (1)	0.2482(2)	0.5781(3)	7.6 (2)	7.2(2)	4.2(2)	0.0 (1)	0.5 (1)	0.4(2)
C	19	0.92581(10)	0.2553(2)	0.5606(3)	6.7 (2)	6.2(2)	5.0(2)	0.5 (1)	-1.1 (1)	0.6(1)
C	20	0.94266(8)	0.3054(2)	0.4478(2)	5.3 (1)	4.4(1)	4.0(1)	-0.2 (1)	-1.0 (1)	-0.4(1)
C	21	0.91522(8)	0.3572(2)	0.3802(2)	4.6 (1)	5.5(1)	3.6(1)	-0.1 (1)	-0.4 (1)	-0.1(1)
C	22	0.92604(8)	0.4076(2)	0.2634(2)	4.6 (1)	5.3(1)	3.9(1)	-0.3 (1)	-0.5 (1)	0.2(1)
C	021	0.69128(9)	0.5103(2)	0.0968(3)	5.6 (2)	7.2(2)	8.2(2)	2.0 (1)	0.3 (2)	0.2(2)
C	022	0.7450 (1)	0.5934(2)	-0.0424(3)	8.4 (2)	6.0(2)	7.3(2)	0.2 (2)	-1.8 (2)	1.5(2)
C	121	0.7430 (1)	0.1349(2)	0.0275(4)	11.3 (3)	6.1(2)	11.2(3)	0.6 (2)	-5.5 (2)	-2.2(2)
C	161	0.7931 (1)	0.1202(4)	0.6077(4)	9.7 (3)	22.9(6)	8.9(3)	-7.1 (3)	1.4 (2)	2.2(4)
C	201	0.99274(9)	0.2923(2)	0.4239(3)	5.7 (2)	7.0(2)	6.1(2)	0.9 (1)	-1.3 (1)	-0.2(2)

Fortsetzung Tabelle B 3:

a) Molekül 1

Atom	x	y	z	U · 10^2
H 05	0.9086 (8)	0.265 (2)	-0.010 (2)	5.9 (7)
H 31	0.7585 (7)	0.437 (1)	-0.120 (2)	5.2 (7)
H 021	0.6856 (9)	0.452 (2)	0.164 (3)	8.6 (9)
H 022	0.6887 (10)	0.570 (2)	0.140 (3)	10.7 (11)
H 023	0.6679 (8)	0.507 (2)	0.030 (3)	8.0 (9)
H 024	0.7768 (9)	0.601 (2)	-0.073 (3)	9.6 (10)
H C25	0.7238 (9)	0.589 (2)	-0.101 (2)	7.9 (9)
H 026	0.7433 (9)	0.651 (2)	0.011 (3)	9.8 (10)
H 101	0,6926 (7)	0.357 (2)	-0.041 (2)	5.8 (7)
H 102	0.7341 (8)	0.292 (2)	0.915 (2)	7.8 (8)
H 111	0.6880 (7)	0.270 (1)	0.118 (2)	5.5 (7)
H 112	0.7267 (8)	0.335 (2)	0.170 (2)	6.7 (7)
H 121	0.711 (1)	0.128 (2)	0.015 (3)	12.4 (13)
H 122	0.755 (1)	0.082 (2)	0.042 (3)	11.6 (12)
H 123	0.766 (2)	0.169 (4)	-0.052 (5)	27.2 (27)
H 131	0.7821 (7)	0.251 (1)	0.277 (2)	5.4 (7)
H 141	0.8401 (8)	0.134 (2)	0.244 (2)	6.9 (8)
H 142	0.8006 (9)	0.071 (2)	0.187 (3)	8.3 (9)
H 151	0.7642 (10)	0.075 (2)	0.392 (3)	9.5 (10)
H 152	0.8145 (10)	0.015 (2)	0.388 (3)	10.6 (11)
H 161	0.806 (2)	0.163 (3)	0.669 (4)	20.4 (18)
H 162	0.764 (2)	0.116 (3)	0.601 (4)	19.8 (20)
H 163	0.801 (2)	0.067 (4)	0.622 (6)	27.1 (28)
H 171	0.8639 (9)	0.204 (2)	0.396 (3)	8.7 (9)
H 181	0.8683 (8)	0.223 (2)	0.660 (2)	6.2 (8)
H 182	0.8592 (8)	0.312 (2)	0.585 (2)	7.3 (8)
H 191	0.9363 (8)	0.193 (2)	0.551 (2)	7.2 (8)
H 192	0.9397 (7)	0.285 (2)	0.633 (2)	5.7 (7)
H 201	1.0047 (10)	0.323 (2)	0.344 (3)	9.6 (10)
H 202	1.010 (9)	0.316 (2)	0.502 (2)	7.4 (8)
H 203	0.9965 (9)	0.233 (2)	0.411 (3)	8.3 (9)
H 211	0.8846 (7)	0.360 (1)	0.407 (2)	4.8 (6)
H 221	0.9509 (8)	0.381 (2)	0.222 (2)	6.3 (7)
H 222	0.9352 (7)	0.473 (1)	0.286 (2)	5.5 (7)

Fortsetzung Tabelle B 3:

b) Molekül 2 (bei entsprechenden Atomen ist die Nummer um 50 bzw. bei dreistelligen um 500 erhöht).

Atom	x	y	z	$U_{11}\cdot10^2$ oder $U\cdot10^2$	$U_{22}\cdot10^2$	$U_{33}\cdot10^2$	$U_{12}\cdot10^2$	$U_{13}\cdot10^2$	$U_{23}\cdot10^2$
O 51	0.50898(6)	0.5703(1)	0.2809(2)	5.43(10)	6.0(1)	6.0(1)	-1.42(9)	-1.05(9)	-0.6 (1)
C 52	0.53949(8)	0.4920(2)	0.3145(2)	4.5 (1)	7.7(2)	5.0(2)	-1.1 (1)	-0.8 (1)	-0.0 (2)
C 53	0.51929(8)	0.4074(2)	0.2452(2)	4.8 (1)	6.0(1)	4.1(1)	-0.5 (1)	-0.1 (1)	1.1 (1)
C 54	0.43166(8)	0.3976(2)	0.1704(2)	4.6 (1)	5.6(1)	2.8(1)	-1.0 (1)	0.33(10)	0.5 (1)
O 54	0.42957(6)	0.3161(1)	0.1452(2)	6.5 (1)	5.11(9)	4.5(1)	-1.40(9)	-0.09(9)	-0.23(9)
C 55	0.38977(8)	0.4561(2)	0.1519(2)	4.1 (1)	6.7(2)	3.6(1)	-0.9 (1)	0.1 (1)	-0.1 (1)
O 55	0.35242(5)	0.4108(1)	0.1106(2)	4.27(9)	7.6(1)	7.0(1)	-1.39(9)	-0.52(9)	-0.1 (1)
C 56	0.38783(8)	0.5461(2)	0.1740(2)	4.4 (1)	7.02(2)	3.8(1)	0.2 (1)	0.6 (1)	0.1 (1)
C 57	0.42963(9)	0.5926(2)	0.2152(2)	6.1 (2)	5.7(2)	4.0(1)	-0.0 (1)	0.2 (1)	-0.4 (1)
O 57	0.43257(8)	0.6747(1)	0.2309(2)	9.1 (2)	5.4(1)	9.2(2)	0.5 (1)	-1.7 (1)	-1.2 (1)
C 58	0.47020(8)	0.5332(2)	0.2380(2)	4.8 (1)	5.7(1)	3.8(1)	-1.0 (1)	-0.3 (1)	-0.2 (1)
C 59	0.47153(8)	0.4429(2)	0.2185(2)	4.3 (1)	5.3(1)	3.3(1)	-0.7 (1)	0.1 (1)	0.1 (1)
C 60	0.54538(9)	0.3739(2)	0.1324(3)	5.8 (1)	6.1(2)	5.3(2)	0.6 (1)	0.8 (1)	1.0 (1)
C 61	0.54217(9)	0.4358(2)	0.0172(2)	5.5 (1)	7.1(2)	4.6(2)	-0.7 (1)	0.4 (1)	0.9 (1)
C 62	0.50552(9)	0.4070(2)	-0.0712(2)	5.5 (1)	6.3(2)	4.3(1)	-1.0 (1)	1.4 (1)	-0.4 (1)
C 63	0.47005(9)	0.4585(2)	-0.0988(2)	6.0 (1)	5.8(1)	4.2(1)	-1.1 (1)	0.4 (1)	0.3 (1)
C 64	0.43180(10)	0.4349(2)	-0.1849(3)	6.6 (2)	7.7(2)	5.3(2)	-1.3 (2)	-0.5 (1)	0.2 (2)
C 65	0.4345 (1)	0.4781(2)	-0.3126(3)	7.5 (2)	10.8(3)	4.5(2)	-0.2 (2)	-0.3 (2)	-0.6 (2)
C 66	0.41337(9)	0.5719(2)	-0.3301(3)	5.3 (1)	10.4(2)	4.5(2)	-1.0 (1)	-0.1 (1)	1.1 (2)
C 67	0.39952(10)	0.6241(2)	-0.2396(3)	5.8 (2)	10.2(2)	5.8(2)	0.5 (2)	0.5 (1)	2.0 (2)
C 68	0.3762 (1)	0.7157(3)	-0.2444(4)	8.4 (2)	10.7(3)	9.3(3)	2.5 (2)	2.1 (2)	3.9 (2)
C 69	0.3328 (1)	0.7167(3)	-0.1650(3)	6.1 (2)	10.3(3)	8.2(2)	1.6 (2)	0.5 (2)	2.7 (2)
C 70	0.34241(9)	0.7046(2)	-0.0297(3)	4.6 (1)	8.3(2)	8.0(2)	1.3 (2)	0.4 (2)	1.2 (2)
C 71	0.33510(9)	0.6259(2)	0.0259(3)	4.6 (1)	8.1(2)	5.9(2)	0.4 (1)	0.3 (1)	0.7 (2)
C 72	0.34429(9)	0.6027(2)	0.1585(3)	5.2 (1)	8.6(2)	5.6(2)	1.0 (1)	1.1 (1)	-0.0 (2)
C 521	0.58799(9)	0.5220(2)	0.2812(3)	4.9 (1)	10.9(3)	7.4(2)	-2.0 (2)	-0.6 (2)	0.4 (2)
C 522	0.53434(10)	0.4803(2)	0.4523(3)	6.8 (2)	10.8(2)	4.7(2)	-1.2 (2)	-0.9 (1)	-0.0 (2)
C 621	0.5131 (1)	0.3141(3)	-0.1274(4)	9.1 (2)	11.0(3)	11.1(3)	2.5 (2)	0.0 (2)	-6.0 (3)
C 661	0.4097 (1)	0.5977(3)	-0.4643(3)	10.8(3)	14.1(3)	5.2(2)	-0.3 (3)	-0.4 (2)	2.2 (2)
C 701	0.3534 (1)	0.7861(2)	0.0334(4)	11.8(3)	6.8(2)	14.7(4)	1.3 (2)	-2.1 (3)	0.5 (3)

Fortsetzung Tabelle B 3:

b) Molekül 2

Atom	x	y	z	U · 10^2
H 505	0.3611 (9)	0.354 (2)	0.105 (3)	8.7 (9)
H 521	0.5931 (8)	0.535 (2)	0.186 (2)	7.8 (10)
H 522	0.5970 (9)	0.587 (2)	0.330 (3)	10.0 (10)
H 523	0.6077 (9)	0.476 (2)	0.309 (3)	9.8 (10)
H 524	0.5030 (8)	0.463 (2)	0.474 (2)	7.3 (8)
H 525	0.5323 (10)	0.423 (2)	0.476 (3)	10.9 (11)
H 526	0.5389 (8)	0.540 (2)	0.496 (2)	6.9 (8)
H 531	0.5183 (7)	0.357 (1)	0.305 (2)	4.6 (6)
H 601	0.5333 (10)	0.307 (2)	0.117 (3)	9.4 (10)
H 602	0.5808 (9)	0.367 (2)	0.161 (3)	9.2 (9)
H 611	0.5729 (8)	0.435 (2)	-0.025 (2)	7.5 (8)
H 612	0.5359 (8)	0.500 (2)	0.045 (3)	7.5 (8)
H 621	0.540 (1)	0.316 (2)	-0.172 (3)	11.2 (12)
H 622	0.491 (1)	0.295 (2)	-0.196 (3)	12.8 (13)
H 623	0.512 (2)	0.280 (4)	-0.087 (5)	22.6 (25)
H 631	0.4681 (7)	0.514 (2)	0.940 (2)	5.8 (7)
H 641	0.4325 (8)	0.363 (2)	0.807 (2)	6.7 (8)
H 624	0.4010 (8)	0.452 (2)	-0.142 (2)	6.4 (7)
H 651	0.418 (1)	0.424 (2)	-0.370 (3)	13.4 (13)
H 652	0.4676 (9)	0.482 (2)	-0.337 (3)	8.6 (9)
H 661	0.389 (1)	0.559 (2)	0.489 (3)	12.9 (13)
H 662	0.437 (1)	0.614 (2)	0.509 (3)	11.2 (12)
H 663	0.391 (1)	0.655 (2)	0.523 (3)	13.2 (13)
H 671	0.4042 (7)	0.603 (2)	0.840 (2)	5.9 (7)
H 681	0.3680 (9)	0.729 (2)	-0.333 (3)	9.0 (10)
H 682	0.397 (1)	0.769 (2)	-0.204 (3)	13.3 (13)
H 691	0.3122 (8)	0.676 (2)	0.806 (2)	6.8 (8)
H 692	0.3183 (10)	0.788 (2)	0.824 (3)	10.9 (11)
H 701	0.400 (1)	0.788 (3)	0.022 (4)	16.9 (17)
H 702	0.3548 (9)	0.838 (2)	0.001 (3)	9.8 (10)
H 703	0.365 (1)	0.784 (3)	0.137 (5)	20.3 (20)
H 711	0.3207 (8)	0.582 (2)	-0.017 (2)	7.2 (8)
H 721	0.3486 (7)	0.659 (2)	0.205 (2)	5.6 (7)
H 722	0.3190 (9)	0.566 (2)	0.190 (2)	7.9 (9)

Tabelle B 4: Beobachtete und berechnete Strukturfaktoren des Tridentochinons (ohne Absorptionskorrektur)

	H,0,0	
4	45	43
6	624	635
8	295	300
10	570	577
12	1075	1095
14	436	447
16	113	120
18	217	220
20	58	30
22	472	474
24	39	37
26	468	468
28	21*	13
30	19*	26
32	164	152
34	57	56

	H,1,0	
3	1084	1180
4	121	124
5	635	653
6	198	205
7	87	83
8	583	582
9	981	1018
10	695	710
11	219	215
12	140	146
13	222	227
14	275	266
15	50	46
16	504	469
17	16*	29
18	215	217
19	167	171
20	17*	11
21	121	119
22	18*	25
23	206	218
24	215	209
25	267	265
26	65	59
27	465	454
28	20*	26
29	99	98
30	18*	20
31	17*	28
32	73	71
33	32	37
34	15*	9
35	15*	6

	H,2,0	
0	1087E	0
1	379	379
2	648	663
3	778	819
4	1069	1124
5	1761	1930
6	136	141
7	177	192
8	313	317
9	72	64
10	183	175
11	1047	1077
12	472	486
13	395	391
14	768	772
15	360	386
16	255	255
17	256	269
18	532	520
19	123	128
20	253	269
21	130	127
22	84	82
23	18*	12
24	266	264
25	424	418
26	319	315
27	284	282
28	95	101
29	58	54
30	61	66
31	33	24
32	59	54
33	30	31
34	112	106
35	33	28

	H,3,0	
1	1429	1495
2	316	322
3	900	912
4	1229	1277
5	244	253
6	289	291
7	232	258
8	242	241
9	118	117
10	182	198
11	866	867
12	212	210
13	88	91
14	558	559
15	50	42
16	331	328
17	168	165
18	234	223
19	383	371
20	17*	10
21	112	105
22	219	215
23	109	109
24	323	325
25	193	183
26	71	75
27	18*	1
28	53	52
29	33	20
30	50	45
31	40	45
32	51	42
33	131	125
34	15*	1
35	64	56

	H,4,0	
0	125	134
1	670	673
2	264	258
3	326	332
4	45	59
5	70	78
6	316	326
7	459	460
8	369	387
9	941	934
10	402	405
11	147	136
12	320	315
13	27	33
14	199	189

H,4,0

15	161	147
16	315	308
17	46	39
18	47	49
19	214	225
20	147	158
21	125	129
22	137	145
23	18*	6
24	39	28
25	66	65
26	85	80
27	96	101
28	18*	9
29	35	33
30	46	48
31	75	73
32	70	71
33	24	23
34	53	43

H,5,0

1	1040	1044
2	197	198
3	181	186
4	328	342
5	452	440
6	472	454
7	394	376
8	172	176
9	517	508
10	52	16
11	214	190
12	62	57
13	30	42
14	172	160
15	445	440
16	225	218
17	299	300
18	121	112
19	296	298
20	95	93
21	141	135
22	206	210
23	233	224
24	89	79
25	85	95
26	18*	15
27	109	107
28	105	104
29	142	138
30	30	21
31	16*	16
32	67	62
33	15*	13
34	14*	3

H,6,0

0	379	371
1	43	33
2	281	273
3	14*	17
4	89	103
5	341	345
6	16*	19
7	131	121
8	307	300
9	372	362
10	452	442
11	647	647
12	149	153
13	129	134
14	150	147
15	272	261
16	267	255
17	55	55
18	160	156
19	18*	12
20	181	182
21	167	160
22	198	205
23	30	15
24	100	100
25	97	93
26	47	43
27	169	159
28	66	70
29	89	91
30	17*	3
31	37	30
32	86	79
33	29	22

H,7,0

1	339	335
2	54	42
3	217	208
4	283	278
5	160	165
6	87	84
7	84	86
8	195	191
9	167	156
10	331	329
11	120	99
12	130	131
13	160	157
14	232	231
15	44	43
16	53	23
17	200	201
18	73	77
19	129	136
20	70	67
21	122	120
22	73	77
23	163	170
24	41	46
25	217	211
26	92	83
27	46	39
28	33	34
29	60	54
30	72	63
31	77	75
32	15*	25

H,8,0

0	480	470
1	226	228
2	462	456
3	15*	6
4	248	248
5	163	145
6	31	28
7	182	164
8	121	112
9	86	91
10	38	32
11	62	67
12	139	137
13	149	148
14	335	338

H,8,0

15	273	270
16	18*	20
17	129	130
18	98	91
19	18*	21
20	18*	19
21	73	72
22	144	144
23	63	63
24	18*	25
25	78	64
26	48	41
27	45	40
28	85	81
29	57	43
30	39	34
31	29	16
32	14*	11

H,9,0

1	55	47
2	36	37
3	370	354
4	16*	32
5	391	371
6	200	194
7	16*	13
8	16*	12
9	78	72
10	219	203
11	113	106
12	305	315
13	95	102
14	85	88
15	17*	1
16	69	67
17	35	42
18	112	110
19	18*	12
20	44	49
21	94	92
22	113	108
23	26	28
24	61	62
25	92	98
26	58	58
27	28	32
28	24	27
29	15*	12
30	84	84

H,10,0

0	558	568
1	50	43
2	130	127
3	106	116
4	179	180
5	35	42
6	45	34
7	106	102
8	83	81
9	51	49
10	170	168
11	151	142
12	267	263
13	76	80
14	277	276
15	117	117
16	113	114
17	169	170
18	18*	1
19	31	24
20	173	175
21	50	45
22	43	43
23	52	51
24	30	22
25	35	27
26	27	21
27	65	60
28	15*	4
29	21	22

H,11,0

1	42	49
2	51	54
3	231	226
4	41	42
5	164	154
6	153	139
7	66	61
8	180	183
9	263	270
10	265	261
11	320	323
12	29	32
13	310	316
14	121	127
15	270	287
16	53	54
17	29	32
18	39	37
19	18*	18
20	48	61
21	36	38
22	93	97
23	34	46
24	27	30
25	16*	20
26	38	29
27	28	27
28	14*	20

H,12,0

0	113	118
1	59	64
2	73	75
3	18*	11
4	75	76
5	17*	9
6	147	139
7	102	106
8	26	21
9	118	122
10	67	64
11	18*	11
12	55	60
13	185	177
14	153	152
15	18*	18
16	194	192
17	55	49
18	60	59
19	28	20
20	47	45
21	32	43
22	50	49
23	52	54
24	15*	9
25	15*	16
26	37	34

H,13,0

2	89	86
3	50	48
4	105	106
5	87	93
6	116	119
7	54	55
8	100	103
9	91	93
10	28	36
11	50	48
12	97	101
13	139	133
14	211	202
15	54	49
16	17*	15
17	17*	4
18	39	36
19	63	58
20	40	43
21	16*	4
22	16*	9
23	98	93
24	92	95

H,14,0

0	41	43
1	99	98
2	123	130
3	88	84
4	79	84
5	32	30
6	38	39
7	101	104
8	128	124
9	18*	25
10	17*	2
11	17*	12
12	109	113
13	73	79
14	90	102
15	17*	18
16	16*	10
17	16*	6
18	16*	21
19	65	69
20	43	38
21	39	38
22	92	85

H,15,0

1	144	135
2	72	68
3	183	180
4	75	77
5	96	94
6	65	67
7	44	42
8	17*	23
9	17*	1
10	65	67
11	17*	11
12	54	46
13	37	28
14	16*	7
15	16*	26
16	34	34
17	15*	8
18	39	35
19	14*	4

H,16,0

0	178	177
1	75	73
2	105	102
3	17*	23
4	62	64
5	33	26
6	52	54
7	16*	22
8	77	82
9	23	17
10	16*	21
11	67	68
12	31	28
13	29	20
14	44	32
15	14*	4
16	47	43

H,17,0

1	118	118
2	39	33
3	72	77
4	15*	12
5	24	31
6	31	26
7	15*	16
8	44	42
9	60	54
10	14*	2
11	14*	3

H,0,1

2	811	856
3	1201E	0
4	394	393
5	92	87
6	1183	1246
7	201	204
8	1103	1134
9	543	557
10	359	363
11	329	344
12	79	56
13	192	196
14	414	426
15	116	101
16	171	171
17	85	75
18	290	288
19	81	74
20	288	275
21	213	210
22	193	190
23	108	98
24	410	412
25	47	48
26	19*	3
27	56	54
28	103	100
29	157	151
30	106	103
31	49	48
32	62	67
33	16*	9
34	67	52
35	58	54

H,1,1

0	354	358
1	641	656

H,1,1

2	666	684
3	663	682
4	868	919
5	935	972
6	1118	1182
7	446	451
8	297	311
9	402	406
10	221	223
11	207	215
12	744	755
13	395	400
14	228	219
15	119	116
16	245	237
17	153	158
18	52	48
19	104	109
20	251	255
21	37	41
22	31	17
23	75	71
24	387	394
25	90	94
26	239	241
27	121	122
28	90	92
29	78	81
30	45	33
31	86	90
32	70	71
33	16*	10
34	56	54
35	54	48

H,2,1

0	458	464
1	1077	1142
2	541	568
3	840	878
4	943	981
5	1014	1061
6	810	822
7	1305	1390
8	83	84
9	724	742
10	924	934
11	505	512
12	293	289
13	618	605
14	322	313
15	441	429
16	206	206
17	330	333
18	165	162
19	144	142
20	101	100
21	101	98
22	52	54
23	209	204
24	41	42
25	83	82
26	223	217
27	226	223
28	89	85
29	18*	30
30	79	78
31	56	53
32	68	66
33	69	66
34	35	30
35	59	49

H,3,1

0	1223	1228
1	644	658
22	81	86
23	355	352
24	42	46
25	177	173
26	156	160
27	97	94
28	59	50
29	74	72
30	85	79
31	91	86
32	25*	11
33	54	59
34	80	73
35	45	42

H,4,1

0	447	452
1	464	449
2	165	163
3	175	184
4	240	243
5	674	685
6	534	533
7	317	316
8	275	282
9	519	496
10	297	286
11	518	508
12	338	330
13	795	772
14	336	324
15	550	529
16	195	185
17	444	433
18	246	244
19	181	184
20	254	251
21	222	221
22	119	120
23	135	134
24	158	153
25	132	131
26	18*	24
27	18*	27
28	48	50
29	53	52
30	79	74
31	84	83
32	30	31
33	16*	5
34	43	36

H,5,1

0	43	66
1	328	317
2	392	379
3	236	241
4	285	268
5	591	584
6	335	330
7	683	677
8	293	294
9	551	537
10	162	150
11	212	213
12	389	383
13	245	245

	H,5,1	
14	183	178
15	236	231
16	203	207
17	227	225
18	197	197
19	53	45
20	191	195
21	82	80
22	268	270
23	133	134
24	97	106
25	92	93
26	70	66
27	152	157
28	48	44
29	17*	14
30	51	48
31	36	40
32	34	33
33	48	44
34	46	45

	H,6,1	
0	642	644
1	108	99
2	233	232
3	34	33
4	533	527
5	460	450
6	469	452
7	695	684
8	218	213
9	122	121
10	59	69
11	354	341
12	138	140
13	335	308
14	57	60
15	284	288
16	119	120
17	78	67
18	17*	21
19	158	152
20	46	44
21	18*	22
22	235	240
23	77	91
24	36	32
25	99	96
26	114	115
27	69	63
28	46	51
29	72	70
30	17*	19
31	51	43
32	70	71
33	26	21

	H,7,1	
0	138	149
1	223	202
2	161	159
3	395	395
4	475	450
5	269	273
6	46	42
7	180	164
8	96	102
9	106	97
10	152	147
11	200	191
12	194	183
13	137	127
14	237	228
15	109	109
16	118	117
17	219	216
18	106	104
19	121	122
20	237	239
21	119	113
22	135	129
23	18*	35
24	111	120
25	64	69
26	108	112
27	176	175
28	17*	13
29	17*	21
30	54	56
31	40	31
32	27	25

	H,8,1	
0	466	446
1	191	184
2	343	331
3	83	73
4	159	155
5	177	163
6	200	192
7	79	76
8	248	230
9	122	122
10	170	170
11	191	190
12	59	52
13	163	165
14	87	78
15	83	81
16	122	123
17	132	124
18	185	189
19	80	77
20	205	200
21	48	50
22	32	28
23	173	171
24	161	159
25	41	43
26	18*	26
27	78	79
28	17*	8
29	51	52
30	23	26
31	47	50

	H,9,1	
0	366	354
1	211	209
2	292	287
3	204	202
4	110	103
5	209	216
7	380	382
8	51	40
9	115	118
10	186	186
11	27	24
12	226	235
13	195	187
14	95	91
15	78	72

H,9,1

16	133	138
17	134	135
18	115	113
19	115	111
20	101	97
21	36	29
22	79	80
23	50	39
24	61	68
25	35	33
26	50	55
27	41	37
28	42	44
29	15*	20
30	56	49

H,10,1

0	25	10
1	61	66
2	201	214
3	234	235
4	17*	19
5	293	286
6	62	59
7	178	167
8	64	53
9	337	333
10	213	213
11	151	147
12	122	117
13	130	140
14	77	72
15	95	95
16	125	128
17	133	138
18	134	136
19	52	48
20	143	141
21	18*	14
22	129	119
23	17*	28
24	61	51
25	42	35
26	33	29
27	23	11
28	15*	25
29	24	26

H,11,1

0	188	181
1	74	69
2	134	138
3	74	71
4	215	209
5	151	155
6	109	109
7	149	141
8	113	104
9	137	137
10	312	312
11	131	126
12	231	226
13	200	196
14	60	56
15	75	76
16	70	63
17	151	143
18	169	168
19	83	81
20	103	104
21	47	46
22	17*	21
23	17*	15
24	53	45
25	56	48
26	33	38
27	15*	8
28	34	29

H,12,1

0	47	54
1	176	176
2	150	154
3	46	46
4	32	35
5	141	136
6	32	26
7	18*	8
8	76	74
9	108	91
10	18*	9
11	66	66
12	51	45
13	149	144
14	90	97
15	157	159
16	127	127
17	63	71
18	39	32
19	69	70
20	41	33
21	73	75
22	82	81
23	16*	12
24	31	30
25	34	37
26	14*	8

H,13,1

0	94	100
1	128	129
2	105	106
3	124	124
4	157	157
5	39	40
6	212	218
7	145	143
8	85	86
9	33	42
10	110	118
11	52	52
12	18*	5
13	66	71
14	107	110
15	18*	18
16	35	35
17	68	65
18	32	38
19	77	72
20	68	57
21	92	90
22	62	58
23	70	65
24	68	60

H,14,1

0	35	28
1	73	79
2	71	67
3	43	36
4	48	52
5	193	198

H,14,1

6	158	153
7	112	116
8	98	100
9	53	52
10	18*	21
11	74	72
12	41	40
13	37	35
14	45	46
15	59	58
16	27	12
17	39	41
18	32	20
19	74	72
20	45	48
21	112	105
22	45	42

H,15,1

0	72	67
1	18*	26
2	199	198
3	93	90
4	99	90
5	74	74
6	54	52
7	64	57
8	44	41
9	17*	27
10	17*	15
11	26	31
12	81	84
13	58	55
14	16*	19
15	25	25
16	16*	16
17	52	53
18	55	56
19	59	60

H,16,1

0	17*	5
1	74	70
2	162	159
3	51	48
4	80	72
5	64	56
6	25	22
7	55	46
8	60	59
9	44	40
10	16*	6
11	16*	19
12	24	25
13	15*	9
14	46	45
15	25	24
16	31	29

H,17,1

0	108	104
1	50	50
2	84	77
3	83	81
4	23	27
5	15*	9
6	31	36
7	37	39
8	45	39
9	32	27
10	33	28
11	23	18

H,0,2

0	252	241
1	276	282
2	1848	2002
3	1673	1798
4	663	684
5	201	192
6	390	387
7	259	261
8	469	485
9	244	255
10	625	633
11	714	717
12	291	288
13	207	203
14	423	436
15	608	609
16	37	29
17	102	103
19	58	57
20	308	307
21	330	332
22	214	211
23	18*	12
24	335	349
25	41	26
26	79	64
27	57	56
28	135	133
29	107	111
30	17*	3
31	94	86
32	37	21
33	26	22
34	33	22
35	76	75

H,1,2

0	1188	1231
1	692	707
2	1099	1154
3	100	98
4	1137	1192
5	1233	1298
6	483	500
7	190	198
8	516	532
9	601	608
10	410	426
11	75	79
12	357	344
13	388	381
14	57	62
15	500	491
16	102	111
17	136	136
18	97	94
19	149	159
20	35	18
21	37	34
22	123	129
23	195	196
24	260	263
25	127	130
26	243	243
27	119	119
28	110	107
29	132	130
30	50	47

	H,1,2	
31	48	48
32	93	93
33	72	70
34	15*	17
35	25	30

	H,2,2	
0	1725	1795
1	473	478
2	879	887
3	740	764
4	1067	1093
5	503	506
6	577	596
7	627	627
8	206	206
9	267	258
10	193	197
11	37	45
12	470	475
13	118	118
14	530	532
15	235	232
16	411	410
17	146	138
18	153	146
19	95	97
20	55	49
21	89	82
22	198	199
23	261	261
24	165	168
25	151	154
26	135	136
27	281	279
28	37	39
29	144	148
30	78	76
31	84	81
32	47	43
33	23	21
34	27	31
35	29	22

	H,3,2	
0	669	671
1	691	699
2	1158	1175
3	623	623
4	1061	1091
5	553	570
6	221	220
7	348	342
8	292	302
9	417	413
10	600	607
11	443	451
12	300	299
13	325	322
14	156	153
15	395	392
16	165	164
17	134	127
18	217	224
19	260	267
20	189	183
21	166	171
22	146	146
23	114	108
24	81	89
25	132	136
26	87	86
27	119	114
28	131	130
29	42	41
30	38	37
31	94	92
32	90	82
33	62	61
34	24	26

	H,4,2	
0	240	235
1	1001	1013
2	881	875
3	620	615
4	672	665
5	79	70
6	206	219
7	228	233
8	304	299
9	277	275
10	269	267
11	585	576
12	55	42
13	270	261
14	353	348
15	389	376
16	169	162
17	285	285
18	251	263
19	241	243
20	120	121
21	99	102
22	157	155
23	201	203
24	105	107
25	186	186
26	30	39
27	62	63
28	41	35
29	89	83
30	46	40
31	34	45
32	37	39
33	49	45
34	42	40

	H,5,2	
0	470	456
1	495	492
2	368	361
3	390	387
4	615	602
5	569	569
6	696	709
7	254	250
8	243	232
9	278	270
10	491	473
11	232	222
12	91	98
13	118	112
14	153	150
15	167	167
16	242	246
17	205	208
18	68	64
19	482	477
20	203	201
21	212	213
22	137	143
23	18*	9

H,5,2

24	146	142
25	106	115
26	38	43
27	43	42
28	44	41
29	17*	19
30	29	30
31	16*	6
32	15*	7
33	51	52

H,6,2

0	161	157
1	385	380
2	324	311
3	607	608
4	117	118
5	180	178
6	263	278
7	345	336
8	193	187
9	166	161
10	450	439
11	127	113
12	71	62
13	263	261
14	57	64
15	88	91
16	156	156
17	56	61
18	247	250
19	148	144
20	246	249
21	85	91
22	98	104
23	86	86
24	127	131
25	92	93
26	84	84
27	66	71
28	31	29
29	17*	13
30	16*	24
31	23	14
32	15*	13
33	23	20

H,7,2

0	178	164
1	410	397
2	245	226
3	94	99
4	400	373
5	390	370
6	331	332
7	148	144
8	335	323
9	132	120
10	340	330
11	169	167
12	245	255
13	200	195
14	147	145
15	121	122
16	356	354
17	191	189
18	202	195
19	132	126
20	35	41
21	171	167
22	58	53
23	81	80
24	51	57
25	90	86
26	33	34
27	41	39
28	28	29
29	16*	2
30	58	56
31	29	21
32	28	33

H,8,2

0	184	176
1	256	254
2	44	36
3	224	219
4	224	225
5	258	256
6	64	62
7	321	318
8	160	146
9	40	39
10	148	142
11	131	127
12	88	96
13	77	77
14	67	70
15	153	152
16	148	150
17	191	197
18	18*	23
19	120	117
20	240	244
21	104	107
22	78	80
23	43	45
24	35	32
25	86	87
26	34	30
27	89	85
28	42	39
29	48	47
30	44	43
31	47	47

H,9,2

0	39	25
1	170	172
2	63	66
3	302	307
4	104	94
5	237	236
6	98	99
7	209	205
8	148	148
9	228	220
10	170	169
11	131	125
12	100	100
13	54	48
14	129	127
15	112	114
16	79	78
17	176	177
18	79	80
19	54	52
20	43	51
21	65	72
22	118	120
23	177	181
24	112	113
25	76	80

H,9,2

26	76	64
27	34	34
28	68	72
29	37	35
30	26	28

H,10,2

0	29	21
1	140	140
2	16*	7
3	233	240
4	72	71
5	29	34
6	134	132
7	260	253
8	115	119
9	118	115
10	140	139
11	161	156
12	77	79
13	254	258
14	65	68
15	107	108
16	44	46
17	138	129
18	93	97
19	87	87
20	186	192
21	64	64
22	86	87
23	37	35
24	17*	27
25	42	53
26	32	27
27	47	42
28	42	35
29	34	33

H,11,2

0	134	126
1	133	134
2	64	73
3	238	244
4	166	170
5	182	188
6	102	101
7	95	95
8	150	150
9	77	82
10	170	163
11	257	262
12	130	129
13	108	109
14	150	142
15	59	55
16	18*	16
17	216	219
18	121	120
19	17*	22
20	60	57
21	136	133
22	85	85
23	58	60
24	54	55
25	51	50
26	15*	12
27	14*	12

H,12,2

0	29	22
1	125	127
2	257	270
3	133	131
4	77	78
5	267	272
6	48	46
7	96	98
8	97	97
9	58	63
10	117	107
11	75	75
12	131	132
13	43	42
14	91	99
15	121	124
16	131	130
17	66	68
18	36	37
19	131	130
20	17*	40
21	91	89
22	42	39
23	37	32
24	38	40
25	38	34
26	22	17

H,13,2

0	47	50
1	158	161
2	35	42
3	79	80
4	18*	25
5	161	165
6	157	156
7	97	101
8	91	93
9	80	76
10	114	100
11	151	152
12	47	59
13	61	56
14	27	26
15	51	55
16	43	38
17	50	46
18	42	38
19	73	76
20	16*	17
21	25	24
22	40	37
23	49	47
24	60	59

H,14,2

0	224	226
1	83	86
2	147	147
3	51	53
4	68	68
5	70	72
6	47	47
7	112	108
8	55	59
9	18*	11
10	111	108
11	77	76
12	49	53
13	78	76
14	75	67
15	55	58
16	21*	18

H,14,2

17	20*	21
18	44	41
19	65	60
20	19*	33
21	64	63

H,15,2

0	142	146
1	22*	30
2	35	37
3	46	51
4	100	93
5	47	59
6	79	71
7	22*	31
8	41	31
9	21*	24
10	21*	3
11	31	18
12	71	71
13	79	76
14	60	58
15	35	40
16	57	52
17	42	37
18	18*	19

H,16,2

0	21*	6
1	30	33
2	60	58
3	30	14
4	73	70
5	21*	12
6	37	45
7	59	57
8	65	60
9	20*	19
10	72	72
11	85	76
12	42	42
13	43	40
14	46	46
15	38	42

H,17,2

0	19*	4
1	32	35
2	46	46
3	45	49
4	41	46
5	19*	12
6	19*	23
7	27	18
8	44	44
9	18*	10
10	61	55

H,0,3

1	643	650
2	1098	1140
3	1964	2107
4	653	661
5	407	421
6	195	196
7	65	69
8	331	333
9	645	656
10	335	331
11	861	879
12	255	265
13	67	64
14	36	40
15	88	81
16	352	350
17	81	83
18	376	373
19	174	174
20	155	159
21	17*	4
22	155	157
23	86	91
24	167	171
25	19*	14
26	353	341
27	130	134
28	135	139
29	73	75
30	98	101
31	17*	27
32	16*	14
33	72	78
34	73	68

H,1,3

0	543	541
1	672	681
2	461	475
3	281	281
4	325	326
5	556	567
6	369	374
7	472	491
8	710	717
9	466	474
10	369	371
11	490	489
12	211	208
13	207	216
14	208	211
15	300	294
16	279	275
17	155	158
18	149	142
19	273	286
20	179	178
21	183	189
22	205	206
23	244	248
24	293	302
25	201	211
26	185	188
27	122	114
28	153	152
29	73	74
30	62	62
31	85	82
32	45	48
33	51	42
34	38	35

H,2,3

0	840	844
1	371	370
2	510	517
3	88	94
4	419	422
5	307	314
6	446	435
7	321	335
8	502	502

	H,2,3	
9	569	568
10	599	596
11	431	416
12	285	285
13	295	279
14	475	481
15	291	286
16	265	259
17	48	52
18	100	96
19	181	181
20	102	113
21	332	333
22	99	97
23	152	160
24	95	94
25	72	72
26	119	117
27	49	43
28	104	107
29	33	33
30	71	75
31	105	102
32	16*	18
33	74	73
34	52	48

	H,3,3	
0	171	168
1	914	919
2	739	733
3	201	203
4	428	426
5	106	109
6	384	392
7	626	621
8	111	111
9	378	369
10	523	519
11	121	117
12	351	346
13	500	504
14	174	183
15	114	102
16	75	70
17	216	216
18	84	85
19	201	199
20	155	164
21	138	149
22	41	39
23	129	128
24	82	85
25	85	88
26	18*	10
27	60	53
28	18*	17
29	111	110
30	49	53
31	52	42
32	75	70
33	29	20
34	79	73

	H,4,3	
0	339	330
1	445	446
2	405	387
3	305	287
4	340	331
5	484	476
6	601	595
7	228	215
8	167	175
9	136	132
10	237	235
11	210	213
12	178	165
13	169	172
14	213	204
15	302	297
16	215	210
17	216	209
18	143	148
19	77	76
20	229	236
21	211	212
22	92	87
23	58	69
24	56	52
25	74	73
26	189	198
27	92	90
28	32	32
29	52	61
30	17*	23
31	73	74
32	53	55
33	23	27

	H,5,3	
0	253	265
1	141	148
2	315	317
3	224	216
4	840	842
5	221	215
6	70	71
7	497	507
8	740	762
9	284	266
10	196	185
11	314	304
12	230	226
13	99	88
14	298	296
15	158	166
16	168	164
17	101	102
18	211	214
19	144	143
20	75	73
21	138	136
22	191	193
23	180	181
24	133	128
25	18*	10
26	44	44
27	41	40
28	31	29
29	17*	13
30	37	40
31	50	46
32	52	50
33	30	25

	H,6,3	
0	212	205
1	141	147
2	441	442
3	369	346
4	351	339
5	871	852

H,6,3

6	363	350
7	414	421
8	418	414
9	253	239
10	254	247
11	230	221
12	134	122
13	25	19
14	222	223
15	39	29
16	87	85
17	134	131
18	115	118
19	149	150
20	253	259
21	100	99
22	123	121
23	88	83
24	107	109
25	48	44
26	30	26
27	52	49
28	39	43
29	68	70
30	16*	18
31	15*	29
32	15*	19

H,7,3

0	272	254
1	106	110
2	221	214
3	384	373
4	151	148
5	141	140
6	244	231
7	264	258
8	140	136
9	91	92
10	121	109
11	233	227
12	164	171
13	167	165
14	121	123
15	113	114
16	161	160
17	233	221
18	229	229
19	99	100
20	158	163
21	99	99
22	227	228
23	86	90
24	110	121
25	32	43
26	37	33
27	34	36
28	63	64
29	92	89
30	37	35
31	46	47

H,8,3

0	167	153
1	457	451
2	355	347
3	135	123
4	315	314
5	207	206
6	99	95
7	61	65
8	149	145
9	24	35
10	44	37
11	188	188
12	90	85
13	24	27
14	147	151
15	96	93
16	124	123
17	196	192
18	44	37
19	220	225
20	212	212
21	151	152
22	175	172
23	98	92
24	106	108
25	35	35
26	80	79
27	56	48
28	16*	19
29	23	22
30	15*	20

H,9,3

0	194	199
1	74	67
2	67	65
3	274	259
4	182	174
5	153	143
6	232	228
7	93	100
8	217	226
9	35	36
10	132	141
11	110	110
12	139	137
13	121	121
14	141	148
15	144	145
16	69	68
17	114	112
18	181	187
19	38	44
20	123	126
21	56	62
22	38	43
23	118	120
24	55	50
25	82	78
26	28	21
27	16*	16
28	60	59
29	70	67

H,10,3

0	43	45
1	172	170
2	70	64
3	228	235
4	88	82
5	76	72
6	90	85
7	54	58
8	92	83
9	57	64
10	207	211
11	196	202
12	279	272
13	116	111
14	93	96

H,10,3

15	142	145
16	108	102
17	53	54
18	133	135
19	155	155
20	44	38
21	86	96
22	66	59
23	61	54
24	16*	17
25	27	31
26	31	30
27	61	57
28	32	28

H,11,3

0	259	256
1	57	59
2	190	195
3	112	108
4	18*	19
5	81	82
6	117	120
7	167	171
8	302	313
9	164	164
10	254	253
11	127	129
12	18*	16
13	196	201
14	73	81
15	200	201
16	34	28
17	99	103
18	102	98
19	57	59
20	107	103
21	59	47
22	65	61
23	48	51
24	40	45
25	57	53
26	37	42
27	41	38

H,12,3

0	18*	20
1	89	85
2	18*	26
3	139	141
4	135	131
5	108	111
6	58	66
7	75	74
8	160	155
9	45	47
10	77	74
11	58	59
12	143	144
13	104	104
14	31	40
15	26	25
16	18*	7
17	64	72
18	34	39
19	141	135
20	31	20
21	24	24
22	59	60
23	32	31
24	49	43
25	14*	15

H,13,3

0	54	53
1	184	191
2	51	44
3	228	235
4	115	119
5	198	202
6	122	120
7	71	65
8	168	169
9	124	128
10	112	113
11	69	67
12	44	51
13	39	40
14	72	70
15	85	84
16	17*	12
17	137	131
18	65	66
19	59	58
20	16*	9
21	31	26
22	43	44
23	14*	9

H,14,3

0	59	57
1	49	47
2	141	151
3	77	78
4	85	85
5	114	110
6	53	54
7	55	62
8	90	96
9	43	50
10	72	72
11	86	85
12	62	63
13	45	46
14	66	71
15	77	75
16	51	53
17	16*	28
18	64	65
19	15*	21
20	25	23

H,15,3

0	111	108
1	62	59
2	64	65
3	51	52
4	138	135
5	18*	26
6	31	39
7	101	100
8	104	99
9	116	114
10	51	49
11	61	59
12	51	58
13	41	40
14	35	35
15	22	22
16	30	34
17	47	50

H,16,3								
			19	106	111	31	43	47
			20	66	59	32	46	44
1	65	63	21	105	105	33	55	55
2	78	85	22	65	65	34	39	40
3	16*	27	23	234	234			
4	35	31	24	60	54		H,2,4	
5	32	37	25	171	172			
6	36	39	26	104	96	0	223	211
7	79	74	27	37	48	1	839	842
8	34	36	28	18*	11	2	710	714
9	68	67	29	17*	3	3	170	177
10	47	48	30	50	55	4	531	548
11	39	41	31	16*	3	5	171	163
12	33	30	32	46	48	6	50	46
13	59	61	33	15*	3	7	681	688
14	39	38	34	53	43	8	274	283
						9	243	243
	H,17,3			H,1,4		10	252	248
						11	154	156
0	40	44	0	625	616	12	330	330
1	28	30	1	290	290	13	420	428
2	15*	11	2	687	696	14	102	100
3	39	39	3	287	292	15	143	143
4	42	42	4	541	552	16	265	253
5	15*	19	5	385	398	17	167	166
6	56	57	6	548	558	18	166	166
7	37	34	7	293	290	19	149	146
8	52	51	8	293	291	20	99	103
			9	503	507	21	124	129
	H,0,4		10	201	200	22	82	77
			11	408	406	23	119	128
0	574	583	12	102	113	24	161	168
1	144	140	13	114	118	25	82	90
2	356	362	14	158	166	26	127	131
3	1085	1122	15	315	312	27	37	37
4	58	60	16	158	153	28	135	138
5	579	587	17	82	82	29	193	192
6	146	135	18	138	145	30	17*	13
7	77	79	19	262	270	31	52	60
8	25	23	20	144	147	32	16*	14
9	398	398	21	263	272	33	47	49
10	395	385	22	242	254			
11	138	131	23	160	169		H,3,4	
12	333	335	24	125	124			
13	117	134	25	80	79	0	101	109
14	118	120	26	35	31	1	329	313
15	122	127	27	28	31	2	299	311
16	133	133	28	97	105	3	859	874
17	305	308	29	114	117	4	223	212
18	127	129	30	17*	2			

	H,3,4	
5	828	841
6	163	167
7	104	107
8	200	204
9	194	195
10	351	345
11	176	166
12	205	208
13	160	168
14	209	213
15	38	45
16	205	204
17	120	134
18	219	232
19	174	178
20	165	166
21	36	34
22	18*	21
23	52	55
24	18*	11
25	84	80
26	139	141
27	95	91
28	44	41
29	111	105
30	45	35
31	130	125
32	26	24
33	56	55

	H,4,4	
0	525	518
1	312	295
2	549	537
3	443	446
4	396	392
5	263	256
6	318	322
7	215	207
8	188	185
9	308	313
10	403	402
11	106	107
12	246	254
13	206	195
14	257	250
15	124	125
16	259	273
17	40	38
18	164	165
19	118	131
20	183	182
21	124	125
22	65	74
23	33	23
24	119	126
25	18*	13
26	80	90
27	59	63
28	26	19
29	65	74
30	81	85
31	45	44
32	88	83
33	26	26

	H,5,4	
0	192	189
1	392	382
2	290	290
3	476	469
4	237	241
5	165	162
6	364	355
7	312	322
8	651	637
9	222	222
10	93	90
11	202	198
12	280	292
13	161	169
14	304	309
15	328	332
16	72	67
17	81	83
18	204	212
19	173	178
20	91	91
21	99	109
22	107	103
23	49	45
24	114	119
25	102	97
26	46	54
27	97	100
28	39	41
29	44	48
30	92	89
31	42	35
32	23	25

	H,6,4	
0	65	55
1	160	155
2	362	361
3	169	160
4	414	408
5	15*	17
6	221	238
7	160	162
8	486	495
9	350	356
10	235	233
11	83	95
12	80	84
13	107	109
14	114	117
15	191	200
16	243	238
17	73	74
18	135	142
19	168	179
20	143	156
21	126	128
22	61	62
23	55	46
24	35	38
25	56	62
26	17*	16
27	45	44
28	16*	9
29	105	98
30	15*	5
31	28	21

	H,7,4	
0	358	338
1	382	368
2	130	118
3	173	172
4	154	154
5	264	259
6	287	292

	H,7,4	
7	118	118
8	172	172
9	150	148
10	208	213
11	36	27
12	91	93
13	208	209
14	340	346
15	252	259
16	111	119
17	286	288
18	48	52
19	237	254
20	85	85
21	58	69
22	99	111
23	18*	13
24	155	151
25	28	31
26	39	34
27	17*	31
28	16*	25
29	64	65
30	15*	2
31	39	31

	H,8,4	
0	16*	10
1	148	156
2	232	223
3	262	266
4	83	78
5	48	45
6	33	34
7	195	192
8	147	147
9	112	111
10	197	194
11	183	186
12	170	168
13	188	189
14	122	123
15	333	338
16	299	301
17	41	38
18	183	183
19	47	45
20	67	68
21	119	116
22	107	111
23	18*	18
24	45	43
25	44	42
26	56	54
27	71	70
28	46	46
29	15*	12
30	33	26

	H,9,4	
0	44	36
1	215	205
2	82	86
3	111	103
4	38	39
5	117	117
6	191	183
7	163	165
8	149	155
9	59	66
10	187	190
11	209	211
12	168	172
13	18*	16
14	142	142
15	64	63
16	162	164
17	223	224
18	89	92
19	66	66
20	57	57
21	99	96
22	69	74
23	49	49
24	17*	24
25	24	20
26	16*	15
27	91	85
28	15*	4
29	41	38

	H,10,4	
0	35	15
1	137	137
2	169	169
3	147	138
4	162	153
5	84	95
6	186	188
7	83	79
8	161	163
9	315	317
10	201	203
11	327	333
12	115	116
13	101	103
14	46	46
15	296	298
16	84	81
17	34	26
18	85	94
19	115	115
20	169	165
21	56	65
22	17*	16
23	107	104
24	16*	16
25	66	66
26	15*	14
27	15*	11

	H,11,4	
0	71	64
1	215	216
2	84	83
3	125	119
4	32	31
5	172	175
6	172	173
7	250	250
8	216	221
9	81	77
10	81	80
11	79	81
12	204	203
13	53	44
14	91	84
15	18*	16
16	143	143
17	105	99
18	72	67
19	140	133
20	61	63

H,11,4

21	47	44
22	53	50
23	35	32
24	70	62
25	15*	9
26	37	32

H,12,4

0	114	125
1	184	177
2	97	95
3	96	95
4	232	227
5	124	123
6	179	174
7	250	244
8	28	17
9	95	89
10	89	85
11	95	91
12	84	85
13	93	92
14	88	87
15	42	39
16	50	48
17	33	34
18	71	66
19	114	114
20	77	74
21	46	38
22	42	44
23	22	28
24	30	33

H,13,4

0	157	168
1	140	140
10	30	32
11	47	42
12	74	71
13	72	68
14	56	49
15	81	76
16	88	76
17	92	92
18	73	67
19	44	46
20	15*	16
21	27	24
22	57	52

H,14,4

0	29	29
1	43	46
2	18*	4
3	112	107
4	40	38
5	39	37
6	106	105
7	37	38
8	31	34
9	44	37
10	17*	5
11	89	85
12	31	20
13	81	73
14	17*	29
15	25	27
16	41	42
17	66	52
18	38	36
19	69	59

H,15,4

0	115	109
1	95	87
2	17*	17
3	17*	13
4	26	18
5	83	79
6	31	21
7	55	48
8	36	38
9	53	50
10	39	46
11	41	34
12	55	50
13	24	18
14	50	44
15	76	73
16	51	51

H,16,4

0	16*	1
1	42	41
2	66	59
3	25	33
4	25	21
5	57	54
6	16*	12
7	15*	16
8	44	51
9	81	80
10	46	44
11	30	36
12	30	32

H,17,4

0	47	41
1	28	24
2	31	29
3	14*	9
4	30	28

H,0,5

1	152	153
2	566	569
3	532	525
4	224	218
5	501	514
6	434	423
7	94	93
8	180	188
9	21	17
10	114	104
11	121	117
12	250	253
13	57	53
14	16*	11
15	332	314
16	74	73
17	17*	3
18	111	102
19	381	369
20	275	270
21	115	120
22	63	53
23	72	52
24	29	37
25	18*	30

H,0,5

26	101	104
27	185	179
28	17*	11
29	74	67
30	34	32
31	16*	11
32	92	86
33	14*	7

H,1,5

0	168	167
1	313	316
2	301	300
3	344	353
4	363	377
5	329	337
6	371	378
7	466	451
8	166	163
9	271	269
10	444	438
11	272	271
12	214	227
13	121	113
14	204	204
15	120	123
16	201	202
17	213	214
18	63	63
19	79	80
20	35	35
21	244	239
22	164	172
23	131	124
24	87	73
25	63	66
26	18*	25
27	46	40
28	80	86
29	78	68
30	16*	19
31	46	47
32	24	31
33	66	59

H,2,5

0	230	236
1	564	544
2	143	143
3	430	431
4	51	42
5	514	507
6	29	31
7	485	491
8	220	216
9	287	289
10	119	117
11	334	333
12	317	314
13	189	185
14	149	146
15	168	167
16	141	133
17	90	87
18	77	74
19	201	205
20	68	61
21	133	139
22	46	57
23	48	46
24	82	81
25	77	73
26	79	80
27	61	68
28	93	84
29	96	99
30	23	22
31	49	55
32	15*	15

H,3,5

0	623	605
1	220	213
3	180	190
4	175	170
5	113	105
6	314	305
7	227	226
8	321	325
9	39	40
10	213	218
11	112	105
12	130	128
13	64	65
14	16*	14
15	81	79
16	325	332
17	110	113
18	132	128
19	55	59
20	101	99
21	155	150
22	118	122
23	163	169
24	93	95
25	118	114
26	121	119
27	34	37
28	64	66
29	36	38
30	30	25
31	62	67
32	23	18

H,4,5

0	95	94
1	444	431
2	245	244
3	256	256
4	129	136
5	261	264
6	167	170
7	278	274
8	419	412
9	419	412
10	330	329
11	211	210
12	137	144
13	47	41
14	134	128
15	57	61
16	171	178
17	136	136
18	84	85
19	119	117
20	248	248
21	81	82
22	71	71
23	61	56
24	114	110
25	67	67
26	82	78
27	53	58

	H,4,5	
28	120	110
29	97	83
30	89	81
31	109	97
32	70	62

	H,5,5	
0	255	238
1	246	233
2	199	200
3	273	254
4	289	275
5	152	136
6	156	151
7	325	305
8	97	101
9	146	146
10	88	90
11	166	159
12	202	197
13	68	79
14	38	42
15	164	159
16	136	135
17	309	304
18	88	90
19	157	149
20	72	73
21	153	152
22	58	55
23	103	96
24	117	109
25	36	36
26	59	64
27	17*	23
28	17*	14
29	71	63
30	54	46
31	34	25

	H,6,5	
0	238	230
1	82	74
2	156	135
3	153	151
4	179	176
5	160	162
6	106	111
7	104	98
8	203	197
9	316	306
10	168	170
11	108	111
12	60	60
13	76	74
14	190	194
15	63	63
16	135	132
17	76	77
18	254	263
19	91	94
20	148	152
21	213	214
22	118	111
23	81	81
24	98	104
25	45	40
26	24	26
27	16*	5
28	41	38
29	85	85
30	35	39

	H,7,5	
0	65	69
1	132	118
2	124	121
3	406	400
4	120	120
5	154	155
6	278	278
7	273	271
8	319	322
9	427	444
10	244	257
11	53	45
12	200	195
13	114	125
14	181	177
15	137	141
16	251	252
17	151	155
18	52	52
19	135	133
20	196	190
21	73	73
22	118	127
23	18*	12
24	18*	37
25	39	41
26	32	39
27	16*	15
28	48	45
29	56	52
30	40	37

	H,8,5	
0	262	260
1	199	205
2	93	105
3	183	181
4	36	40
5	161	160
6	158	166
7	158	159
8	103	106
9	135	146
10	101	100
11	136	134
12	48	50
13	218	225
14	33	25
15	263	270
16	18*	23
17	170	176
18	304	302
19	60	66
20	125	130
21	115	113
22	68	69
23	38	41
24	24	10
25	34	30
26	53	50
27	15*	8
21	113	113
22	62	69
23	37	41
24	17*	10
25	27	30
26	49	50
27	15*	8
28	54	53

H,8,5

29	59	57

H,9,5

0	57	55
1	99	106
2	178	186
3	350	362
4	235	243
5	198	197
6	73	80
7	101	103
8	48	53
9	289	294
10	252	258
11	206	208
12	271	277
13	229	236
14	219	226
15	116	120
16	159	164
17	164	169
18	28	32
19	42	43
20	49	55
21	53	54
22	34	24
23	51	49
24	66	72
25	27	30
26	61	58
27	105	104

H,10,5

0	47	38
1	252	254
2	80	75
3	121	117
4	80	86
5	85	92
6	298	298
7	200	207
8	216	218
9	157	161
10	111	112
11	40	35
12	69	82
13	164	170
14	201	202
15	176	177
16	34	28
17	114	113
18	74	76
19	51	44
20	48	29
21	17*	14
22	46	47
23	25	32
24	42	34
25	66	64
26	31	33

H,11,5

0	257	272
1	95	98
2	28	27
3	80	84
4	108	116
5	140	145
6	28	25
7	156	164
8	142	152
9	92	96
10	110	119
11	26	28
12	98	93
13	102	106
14	154	158
15	73	75
16	17*	23
17	74	77
18	17*	11
19	98	97
20	16*	23
21	59	63
22	34	31
23	25	32
24	66	74

H,12,5

0	18*	1
1	156	167
2	69	71
3	80	92
4	55	62
5	113	124
6	27	29
7	27	31
8	47	47
9	84	82
10	85	91
11	42	41
12	110	120
13	61	71
14	88	85
15	49	40
16	65	68
17	64	61
18	30	43
19	26	35
20	15*	20
21	42	43
22	33	37
23	56	54

H,13,5

0	87	81
1	18*	40
2	180	189
3	74	77
4	134	148
5	123	127
6	55	69
7	52	52
8	102	109
9	31	31
10	33	25
11	76	82
12	42	44
13	32	31
14	69	73
15	57	62
16	53	46
17	54	60
18	37	42
19	25	25
20	39	38

H,14,5

0	17*	17
1	86	92
2	85	84

H,14,5		
3	46	49
4	30	35
5	17*	21
6	84	87
7	17*	19
8	30	31
9	27	45
10	39	42
11	30	32
12	44	42
13	72	76
14	38	40
15	64	63
16	44	44
17	41	41

H,15,5		
0	25	23
1	45	38
2	27	29
3	40	39
4	48	44
5	31	31
6	16*	17
7	37	41
8	30	27
9	34	37
10	15*	27
11	47	53
12	32	27
13	14*	10
14	26	23

H,16,5		
0	49	54
1	15*	7
2	29	32
3	22	3
4	34	32
5	38	38
6	32	39
7	15*	23
8	54	55
9	37	42

H,0,6		
0	55	28
1	304	315
2	378	381
3	31	20
4	285	283
5	539	527
6	335	340
7	371	375
8	523	280
9	309	308
10	367	373
11	16*	30
12	149	138
13	92	92
14	168	179
15	110	109
16	17*	17
17	62	54
18	217	229
19	19*	4
20	73	86
21	27	32
22	73	87
23	44	52
24	29	22
25	18*	25
26	90	88
27	107	102
28	66	63

H,1,6		
0	393	393
1	366	361
2	350	363
3	493	476
4	295	305
5	340	335
6	97	96
7	467	470
8	168	189
9	365	374
10	73	76
11	199	216
12	16*	5
14	163	176
15	115	109
16	81	83
18	111	116

H,2,6		
6	483	469
7	463	456
8	125	116
9	201	200
10	214	220
11	141	125
12	115	111
13	189	189
14	55	46
15	275	284
16	141	153
17	202	215
18	285	290
19	96	111
20	137	136
21	166	178
22	51	68
23	53	64
24	98	100
25	90	94
26	71	74
27	105	104
28	51	51
29	59	56
30	72	70
31	32	30

H,3,6		
0	162	156
1	172	169
2	109	98
3	339	340
4	197	196
5	157	161
6	140	126
7	298	294
8	81	71
9	322	318
10	270	258
11	144	149
12	176	177
13	129	132
14	40	36
15	70	65
16	56	49

H,3,6

17	53	52
18	252	251
19	213	217
20	154	165
21	74	83
22	50	50
23	111	116
24	82	86
25	28	35
26	44	37
27	29	27
28	82	81
29	42	38
30	57	44
31	26	29

H,4,6

0	195	200
1	380	378
2	169	164
3	175	162
4	92	101
5	112	114
6	185	180
7	267	261
8	252	251
9	148	145
10	151	149
11	176	183
12	128	129
13	33	37
14	118	120
15	81	85
16	81	77
17	46	47
18	71	63
19	143	141
20	145	133
21	32	32
22	33	13
23	28	26
24	36	64
25	76	73
26	82	78
27	17*	26
28	76	79
30	60	50

H,5,6

0	171	165
1	228	216
2	213	204
3	312	301
4	167	167
5	262	258
6	62	57
7	89	86
8	385	384
9	161	158
10	272	271
11	122	128
12	306	307
13	63	71
14	164	152
15	105	107
16	127	128
17	93	98
18	136	134
19	122	121
20	180	179
21	105	107
22	59	56
23	99	98
24	57	66
25	54	51
26	63	63
27	58	59
28	72	71
29	34	29
30	59	53

H,6,6

0	181	189
1	231	233
2	38	56
3	88	92
4	267	266
5	202	203
6	308	307
7	208	208
8	236	239
9	105	97
10	62	62
11	154	158
12	242	239
13	306	297
14	307	297
15	73	80
16	20*	57
17	118	130
18	118	121
19	100	98
20	78	83
21	18*	22
22	73	83
23	39	49
24	71	70
25	126	122
26	72	72
27	47	44
28	29	28
29	37	34

H,7,6

0	124	124
1	203	191
2	202	208
3	167	160
4	17*	1
5	69	61
6	125	121
7	116	115
8	120	116
9	123	111
10	233	247
11	242	247
12	209	217
13	227	234
14	227	224
15	337	336
16	133	133
17	131	129
18	149	153
19	116	107
20	18*	17
21	74	76
22	63	61
23	18*	27
24	57	55
25	41	34
26	37	35
27	79	74
28	26	20

H,8,6		
0	69	76
1	87	93
2	133	123
3	78	91
4	217	210
5	188	183
6	176	177
7	171	173
8	92	92
9	303	300
10	193	190
11	68	58
12	272	274
13	104	101
14	206	208
15	19*	27
16	67	65
17	126	125
18	34	37
19	18*	25
20	36	37
21	45	49
22	17*	16
23	43	37
24	17*	2
25	16*	19
26	47	51
27	64	60

H,9,6		
0	19*	36
1	91	93
2	113	113
3	83	92
4	55	49
5	74	75
6	119	125
7	363	373
8	143	144
9	108	110
10	199	204
11	222	224
12	121	124
13	168	163
14	125	124
15	256	253
16	116	119
17	62	63
18	134	138
19	89	82
20	26	19
21	38	34
22	42	38
23	16*	21
24	47	54
26	15*	12

H,10,6		
0	97	94
1	54	58
2	205	216
3	102	108
4	168	179
5	117	121
6	116	123
7	133	134
8	19*	22
9	106	107
10	121	120
11	183	185
12	239	240
13	39	32
14	67	78
15	125	127
16	18*	20
17	66	63
18	69	74
19	17*	17
20	52	51
21	41	47
22	85	81
23	16*	10
24	15*	18

H,11,6		
0	42	41
1	119	122
2	35	35
3	53	55
4	140	170
5	134	136
6	57	54
7	163	158
8	49	56
9	86	95
10	176	176
11	138	129
12	77	78
13	54	52
14	65	66
15	161	168
16	75	70
17	68	68
18	79	63
19	17*	10
20	16*	11
21	47	44
22	41	36
23	53	48

H,12,6		
0	65	67
1	85	81
2	43	42
3	50	46
4	146	149
5	48	47
6	57	62
7	155	153
8	94	99
9	99	105
10	59	60
11	87	83
12	46	43
13	118	119
15	43	42
16	136	120
17	17*	10
18	66	63
19	40	39
20	31	27
21	33	29

H,13,6		
0	19*	5
1	101	102
2	36*	57
3	18*	16
4	95	90
5	71	74
6	76	79
7	52	50

	H,13,6	
8	102	112
9	40	43
10	28	26
11	114	109
12	75	79
13	53	51
14	50	49
15	25	5
16	16*	10
17	50	54
18	55	53

	H,14,6	
0	18*	1
1	38	34
2	17*	9
3	18*	23
4	50	55
5	17*	26
6	17*	20
7	92	87
9	73	71
10	83	76
11	26	25
12	36	43
13	35	35
14	45	48
15	15*	17

	H,15,6	
0	53	20
1	62	64
2	64	63
3	32	39
4	35	34
5	33	56
6	16*	24
7	29	34
8	50	51
9	26	25
10	30	35
11	38	38

	H,16,6	
0	35	31
1	46	46
2	80	83

	H,0,7	
1	100	103
2	46	53
3	200	205
4	275	276
5	115	115
6	231	239
7	31	24
8	95	95
9	159	156
10	108	112
11	32	37
12	225	235
13	244	245
14	41	64
15	57	72
16	18*	13
17	145	152
18	161	170
19	67	78
20	177	177
21	41	50
22	147	150
23	18*	23
24	92	101
25	150	144
26	17*	10
27	38	40
28	27	15
29	150	147
30	43	40

	H,1,7	
0	134	140
1	16*	20
2	236	240
3	94	100
4	330	342
5	434	440
6	398	432
7	114	121
8	150	148
9	171	168
10	167	176
11	46	48
12	205	210
13	80	85
14	84	80
15	82	84
16	249	253
17	67	72
18	39	33
19	164	179
20	229	239
21	73	99
22	139	136
23	104	116
24	18*	21
25	69	68
26	18*	19
27	17*	18
28	81	80
29	46	38
30	60	50

	H,2,7	
0	45	40
1	102	93
2	160	160
3	319	311
4	423	415
5	122	125
6	127	125
7	337	341
8	326	318
9	136	137
10	100	100
11	167	164
12	113	109
13	71	68
14	73	81
15	239	241
16	164	155
17	168	170
18	56	52
19	92	112
20	41	42
21	55	49
22	88	95
23	38	32
24	59	56
25	63	63
26	34	33

	H,2,7	
27	41	43
28	68	61
29	51	50
30	63	66

	H,3,7	
0	109	112
1	188	174
2	188	175
3	197	186
4	203	193
5	250	240
6	465	465
7	115	114
8	281	273
9	130	125
10	152	147
11	94	97
12	73	90
13	110	117
14	142	146
15	119	119
16	161	162
17	184	191
18	19*	22
19	149	150
20	71	70
21	126	137
22	19*	23
23	18*	10
24	44	39
25	71	69
26	17*	13
27	27	12
28	61	61
29	73	64

	H,4,7	
0	18*	22
1	44	49
2	127	122
3	156	169
4	80	86
5	210	210
6	59	62
7	72	74
8	226	224
9	199	200
10	217	226
11	143	143
12	295	303
13	195	204
14	213	213
15	218	231
16	143	146
17	111	114
18	177	171
19	158	159
20	47	51
21	90	94
22	143	143
23	209	200
24	67	63
25	25	8
26	74	73
27	61	59
28	55	60
29	76	74

	H,5,7	
0	156	155
1	91	86
2	48	41
3	219	216
4	138	150
5	209	203
6	174	235
7	85	80
8	217	216
9	73	85
10	209	206
11	241	247
12	221	223
13	181	180
14	161	159
15	85	74
16	199	220
17	64	68
18	105	105
19	83	84
20	89	86
22	73	73
23	18*	20
24	137	142
25	51	46
26	57	45
27	67	78
28	63	57

	H,6,7	
0	327	318
1	225	208
2	180	179
3	91	81
4	18*	14
5	152	152
6	136	138
7	133	132
8	51	43
10	187	184
11	232	220
12	103	102
13	154	158
14	110	110
15	106	109
16	201	207
17	113	114
18	64	67
19	66	60
20	18*	7
21	42	48
22	63	56
23	18*	19
24	87	87
25	48	47
26	45	36
27	57	62
28	51	44

	H,7,7	
0	45	44
1	119	117
2	127	112
3	279	277
4	163	160
5	120	119
6	113	113
7	135	134
8	161	160
9	156	159
18	121	120
19	75	76

H,7,7

20	78	74
21	35	28
22	68	68
23	40	35
24	17*	7
25	17*	18
26	37	26
27	39	30

H,8,7

0	154	164
1	179	178
2	171	173
3	51	56
4	132	120
5	61	63
6	190	191
7	169	170
8	55	61
10	152	157
11	53	51
12	61	67
13	188	191
14	132	128
15	65	61
16	169	174
17	46	46
18	61	58
19	34	24
20	57	56
21	37	37
22	47	44
23	32	25
24	56	55
25	57	60

H,9,7

0	39	49
1	19*	29
2	117	120
3	137	140
4	37	36
5	66	71
6	140	140
7	50	46
8	84	87
9	226	228
10	145	144
11	84	79
12	74	79
13	53	55
14	79	80
15	129	129
16	68	66
17	109	104
18	50	48
19	50	58
20	28	15
21	17*	8
22	17*	22
23	16*	18
24	46	39

H,10,7

0	63	63
1	185	180
2	46	46
3	145	145
4	94	95
5	49	48
6	140	135
7	93	91
8	95	84
9	119	123
10	109	111
11	54	48
12	82	77
13	57	57
14	18*	12
15	80	81
16	66	71
17	84	81
18	94	87
19	73	69
20	17*	17
21	16*	6
22	27	29
23	45	44

H,11,7

0	116	120
1	53	50
2	157	163
3	89	96
4	135	135
5	60	71
6	60	63
7	76	72
8	40	38
9	28	33
10	113	112
11	19*	29
12	122	117
13	34	28
14	92	89
15	18*	29
16	195	196
17	61	56
18	46	47
19	40	45
20	44	38
21	15*	11

H,12,7

0	137	139
1	79	80
2	62	53
3	55	59
4	19*	2
5	36	43
6	81	82
7	105	102
8	68	64
9	96	98
10	61	59
11	104	101
12	18*	25
13	79	72
14	81	78
15	71	70
16	45	46
17	16*	17
18	34	31

H,13,7

0	120	124
1	18*	6
2	81	83
3	68	63
4	113	112
5	80	83

H,13,7			9	34	42	27	26	26
			10	50	55	28	39	37
6	41	43	11	135	137			
7	18*	30	12	89	88		H,2,8	
8	125	124	13	45	43			
9	74	71	14	75	86	0	34	41
10	44	44	15	139	141	1	170	173
11	61	69	16	103	104	2	95	92
12	53	56	17	59	50	3	146	154
13	33	34	18	186	200	4	55	49
14	44	40	19	54	61	5	202	206
15	31	36	20	38	28	6	261	270
16	47	48	21	19*	15	7	96	105
			22	30	15	8	150	156
H,14,7			23	29	20	9	129	138
			24	54	58	10	187	175
0	17*	7	25	56	50	11	127	126
1	30	27	26	41	37	12	19*	30
2	128	129	27	77	72	13	226	231
3	45	45	28	27	18	14	30	16
4	44	40				15	103	107
5	33	29		H,1,8		16	139	139
6	17*	13				17	42	51
7	38	44	0	405	397	18	166	170
8	49	53	1	67	65	19	55	52
9	72	76	2	155	148	20	95	97
10	62	67	3	42	46	21	104	110
11	56	53	4	293	290	22	56	57
12	53	55	5	219	214	23	83	89
			6	64	74	24	18*	28
H,15,7			7	119	111	25	28	23
			8	18*	38	26	83	79
3	38	45	9	264	264	27	16*	26
4	69	67	10	239	241	28	87	89
5	30	31	11	190	198			
6	25	22	12	135	141		H,3,8	
5	23*	31	13	65	74			
6	23*	22	14	71	73	0	48	43
			15	106	108	1	163	169
H,0,8			16	82	81	2	231	225
			17	158	151	3	70	70
0	89	86	18	149	153	4	141	144
1	122	126	19	142	137	5	39	41
2	320	330	20	105	110	6	189	186
3	51	64	21	57	43	7	164	161
4	249	243	22	86	82	8	236	237
5	58	61	23	76	74	9	202	205
6	128	137	24	69	67	10	110	114
7	241	237	25	17*	19	11	141	144
8	71	76	26	86	84			

H,3,8

12	100	102
13	68	57
14	58	56
15	143	146
16	159	160
17	242	244
18	73	78
19	56	59
20	71	66
21	114	111
22	30	30
23	54	53
24	17*	22
25	17*	15
26	87	87
27	53	58
28	73	68

H,4,8

0	405	410
1	184	186
2	267	277
3	156	154
4	226	220
5	100	97
6	47	40
7	151	153
8	216	212
9	154	148
10	104	107
11	193	193
12	315	312
13	187	193
14	244	242
15	128	134
16	130	129
17	83	84
18	123	125
19	51	54
20	38	37
21	18*	16
22	18*	12
23	26	25
24	50	46
25	60	57
26	16*	21
27	15*	7

H,5,8

0	28	33
1	67	66
2	195	196
3	332	340
4	104	108
5	253	261
6	172	178
7	106	114
8	196	202
9	95	101
10	208	201
11	242	241
12	131	134
13	48	37
14	133	125
15	166	162
16	54	60
17	70	63
18	87	93
19	74	75
20	30	26
21	65	61
22	67	67
23	65	70
24	17*	23
25	16*	20
26	30	32

H,6,8

0	122	129
1	122	113
2	104	111
3	91	89
4	80	77
5	113	116
6	115	123
7	215	224
8	63	66
9	60	64
10	121	116
11	171	175
12	144	151
13	276	284
14	131	133
15	101	94
16	86	87
17	39	35
18	68	74
19	111	112
20	109	112
21	35	39
22	64	58
23	43	41
24	34	38
25	78	74
26	42	41

H,7,8

0	70	72
1	167	158
2	141	155
3	168	176
4	19*	19
5	56	60
6	135	135
7	96	93
8	43	45
9	55	54
10	172	175
11	127	130
12	122	125
13	45	41
14	85	86
15	33	34
16	100	100
17	97	98
18	44	37
19	73	73
20	38	30
21	50	51
22	27	33
23	94	101
24	60	59
25	72	70

H,8,8

0	53	49
1	157	162
2	138	136
3	109	114
4	134	137
5	124	131
6	19*	21

H,8,8

7	208	209
8	71	74
9	107	108
10	109	111
11	101	99
12	85	88
13	48	50
14	65	64
15	53	55
16	63	61
17	124	124
18	48	48
19	17*	15
20	117	114
21	17*	12
22	50	46
23	37	36

H,9,8

0	48	56
1	162	164
2	52	50
3	102	108
4	41	35
5	101	104
6	38	47
7	144	132
8	19*	8
9	89	94
10	39	33
11	19*	10
12	127	125
13	117	110
14	35	35
15	18*	9
16	45	40
17	85	82
18	29	30
19	47	44
20	25	27
21	26	36
22	15*	15

H,10,8

0	114	114
1	69	70
2	78	72
3	64	64
4	42	40
5	111	113
6	33	33
7	87	83
8	82	81
9	41	49
10	58	52
11	79	79
12	81	87
13	90	92
14	43	46
15	58	65
16	84	88
17	44	47
18	48	46
19	36	35
20	73	69

H,11,8

0	19*	1
1	72	73
2	38	33
3	19*	19
4	19*	20
5	81	81
6	18*	14
7	44	41
8	18*	13
9	18*	26
10	18*	23
11	31	35
12	31	21
13	102	103
14	124	125
15	44	39
16	35	31
17	51	51
18	15*	30

H,12,8

0	46	58
1	20*	30
2	57	70
3	19*	31
4	140	145
5	36	34
6	54	53
7	17*	14
8	59	59
9	63	66
10	17*	5
11	33	40
12	74	76
13	88	83
14	77	74
15	15*	9

H,13,8

0	124	107
1	44	48

H,0,9

1	142	147
2	81	90
3	358	357
4	88	96
5	76	71
6	68	62
7	189	180
8	150	147
9	49	41
10	30	21
11	117	118
12	19*	19
13	19*	11
14	108	108
15	49	46
16	79	81
17	97	94
18	67	71
19	51	42
20	18*	16
21	74	76
22	97	93
23	52	47
24	53	56
25	27	22
26	34	33

H,1,9

0	78	79
1	169	164

H,1,9

2	121	121
3	135	144
4	174	179
5	96	103
6	287	291
7	217	220
8	178	182
9	66	70
10	220	228
11	179	181
12	94	94
13	64	64
14	40	32
15	146	141
16	69	70
17	192	196
18	103	100
19	188	185
20	32	34
21	18*	28
22	85	77
23	73	77
24	50	45
25	48	37
26	51	47

H,2,9

0	115	111
1	205	196
2	282	288
3	78	87
4	57	55
5	174	168
6	107	103
7	275	268
8	180	182
9	145	154
10	77	78
11	142	140
12	77	78
13	99	98
14	220	214
15	117	118
16	111	109
17	19*	33
18	39	30
19	67	64
20	104	102
21	105	101
22	18*	18
23	69	69
24	58	53
25	26	25
26	38	34

H,3,9

0	69	70
1	57	51
2	51	44
3	106	102
4	62	62
5	179	171
6	295	286
7	348	342
8	182	175
9	261	263
10	214	218
11	114	118
12	168	171
13	68	69
14	207	206
15	81	78
16	140	145
17	67	57
18	65	61
19	71	67
20	115	118
21	33	40
22	47	40
23	53	53
24	28	30
25	16*	25

H,4,9

0	117	118
1	87	78
2	153	154
3	52	46
4	120	114
5	79	84
6	95	98
7	147	149
8	99	93
9	95	88
10	154	162
11	114	115
12	39	39
13	115	114
14	79	76
15	49	49
16	114	113
17	129	127
18	61	61
19	123	119
20	49	49
21	69	66
22	28	40
23	77	75
24	59	56
25	93	91

H,5,9

0	238	244
1	50	62
2	125	122
3	76	68
4	166	163
5	171	182
6	196	194
7	49	53
8	74	75
9	83	77
10	20*	29
11	153	152
12	91	90
13	60	56
14	37	30
15	36	24
16	57	55
17	54	55
18	130	124
19	18*	12
20	18*	8
21	45	49
22	39	32
23	53	47
24	47	48

H,6,9

0	113	111
1	40	45
2	49	49

H,6,9

3	112	112
4	178	179
5	121	121
6	73	80
7	88	77
8	108	109
9	67	71
10	57	57
11	19*	28
12	61	57
13	60	65
14	68	67
15	134	127
16	123	115
17	41	37
18	64	73
19	49	48
20	111	111
21	75	74
22	93	88
23	81	82

H,7,9

0	270	274
1	147	146
2	20*	5
3	100	102
4	64	57
5	74	80
6	44	35
7	19*	17
8	20*	31
9	20*	16
10	79	74
11	19*	19
12	37	38
13	56	54
14	60	58
15	60	63
16	27	18
17	76	76
18	43	38
19	112	108
20	40	36
21	40	41
22	42	40

H,8,9

0	130	137
1	152	158
2	29	15
3	58	55
4	50	53
5	167	164
6	145	150
7	117	114
8	100	98
9	71	72
10	50	45
11	63	57
12	18*	22
13	94	89
14	70	61
15	54	48
16	39	45
17	87	91
18	39	35
19	79	79
20	69	63
21	15*	7

H,9,9

0	91	98
1	23*	33
2	65	75
3	95	92
4	127	128
5	31	38
6	68	64
7	19*	11
8	107	96
9	68	73
10	19*	20
11	48	47
12	30	28
13	18*	26
14	66	63
15	55	47
16	55	51
17	66	65
18	66	65
19	32	31

H,10,9

10	18*	3
11	58	64
12	60	58
13	60	51
14	46	51
15	17*	13
16	62	59

H,0,10

2	124	118
3	198	200
4	67	60
5	46	46
6	255	267
7	109	117
8	19*	18
9	19*	10
10	65	59
11	19*	35
12	73	78
13	45	35
14	52	62
15	115	116
16	75	70
17	146	144
18	49	39
19	72	64
20	52	49
21	105	107
22	26	24
23	63	57

H,1,10

0	35	43
1	137	136
2	59	63
3	120	121
4	212	222
5	316	316
6	268	274
7	63	56
8	224	225
9	117	116
10	127	128
11	19*	16
12	143	141
13	52	58

H,1,10

14	85	84
15	19*	12
16	81	81
17	123	126
18	77	76
19	71	76
20	35	36
21	48	58
22	36	33
23	28	36

H,2,10

0	67	56
1	32	35
2	164	170
3	97	97
4	275	286
5	33	26
6	44	46
7	97	99
8	190	196
9	103	107
10	88	88
11	79	71
12	64	64
13	111	107
14	108	108
15	78	76
16	59	62
17	77	78
18	132	131
19	18*	20
20	56	61
21	56	57
22	85	91
23	33	29

H,3,10

0	52	47
1	163	162
2	148	144
3	121	122
4	157	153
5	87	93
6	164	160
7	112	104
8	94	86
9	109	118
10	61	59
11	40	41
12	86	79
13	35	22
14	133	124
15	101	108
16	74	66
17	73	71
18	94	89
19	101	99
20	39	43
21	52	57
22	16*	8

H,4,10

0	32	23
1	134	133
2	51	42
3	59	55
4	96	92
5	20*	15
6	59	60
7	59	65
8	97	92
9	127	132
10	19*	12
11	55	51
12	63	68
13	19*	31
14	87	88
17	68	65
18	79	82
19	73	70
20	100	98
21	16*	20
22	24	23

H,5,10

0	75	61
1	95	88
2	42	32
3	60	62
4	53	61
5	67	62
6	106	111
7	102	100
8	88	82
9	88	88
10	100	100
11	53	43
12	50	59
13	46	43
14	40	33
15	71	66
16	72	76
17	74	74
18	33	20
19	17*	19
20	36	38
21	83	78

H,6,10

0	89	87
1	115	113
2	164	173
3	83	87
4	74	75
5	69	59
6	96	104
7	59	67
8	100	101
9	85	89
10	51	44
11	57	60
12	71	69
13	18*	31
14	18*	18
15	45	46
16	44	51
17	36	37
18	17*	23
19	51	56
20	71	72

H,7,10

0	22*	24
1	86	95
2	48	50
3	83	92
4	28	37
5	60	58
6	113	112
7	82	80

H,7,10

8	82	83
9	57	56
10	52	50
11	41	43
12	41	45
13	18*	17
14	77	77
15	67	71
16	54	50
17	35	37
18	37	28
19	36	26

H,8,10

5	108	103
6	40	39
7	72	65
8	84	84
9	86	89
10	18*	17
11	28	32
12	18*	20
13	62	65
14	39	34
15	17*	30
16	46	48
17	46	49

H,0,11

1	63	68
2	24*	39
3	183	185
4	45	51
5	24*	17
6	121	127
7	19*	9
8	85	87
9	86	91
10	35	34
11	18*	11
12	76	67
13	18*	17
14	41	36
15	17*	16
16	96	93
17	95	92
18	16*	19
19	16*	1
20	62	72

H,1,11

0	63	65
1	153	155
2	19*	14
3	49	46
4	180	174
5	104	104
6	38	45
7	19*	21
8	76	77
9	93	91
10	94	97
11	91	91
12	18*	22
13	18*	19
14	43	46
15	50	53
16	97	98
17	34	23
18	97	104
19	16*	21
20	39	40

H,2,11

0	80	92
1	96	91
2	32	29
3	33	36
4	19*	23
5	69	60
6	168	170
7	99	106
8	72	70
9	28	31
10	43	43
11	30	16
12	80	83
13	95	100
14	18*	19
15	55	60
16	85	87
17	66	75
18	38	39
19	96	90

H,3,11

0	72	79
1	135	131
2	45	38
3	95	103
4	49	42
5	51	56
6	117	124
7	39	45
8	67	68
9	145	159
10	53	51
11	45	43
12	76	81
13	18*	15
14	45	50
15	33	26
16	78	85
17	35	47
18	39	25
19	32	35

H,4,11

0	77	81
1	109	113
2	118	125
3	55	56
4	48	52
5	30	34
6	86	89
7	162	169
8	33	24
9	47	48
10	37	43
11	86	91
12	79	85
13	38	47
14	17*	10
15	63	60
16	17*	15
17	42	55
18	43	43

H,5,11

0	40	42

TABELLE BS: ATOMPARAMETER(STANDARDABWEICHUNGEN IN KLAMMERN)

DIE TEMPERATURFAKTOREN SIND GEGEBEN DURCH
T(ANISO)=EXP(-2.*PI**2*(U11*(H*ASTAR)**2+U22*(K*BSTAR)**2+U33*(L*CSTAR)**2+2.
*U12*H*K*ASTAR*BSTAR+2.*U13*H*L*ASTAR*CSTAR+2.*U23*K*L*BSTAR*CSTAR))
T(ISO)=EXP(-2.PI**2*U*(2.*SIN(THETA)/LAM)**2))

C	1	-.0502(1)	.6667(4)	.5075(5)	3.7(2)	4.8(3)	2.8(3)	.5(2)	.1(2)	.6(2)
C	2	-.0314(1)	.7470(5)	.5475(6)	3.6(2)	7.2(4)	4.3(4)	-.1(2)	-.7(2)	.7(3)
O	2	-.0058(1)	.7239(4)	.5938(5)	4.6(2)	9.1(3)	8.4(3)	-.9(2)	-2.8(2)	1.7(3)
H	002	-.007 (1)	.667 (4)	.622 (6)	8. (2)					
C	3	-.0369(1)	.8751(5)	.5422(6)	5.7(3)	7.2(4)	2.9(3)	-1.7(3)	-.9(2)	-.3(3)
O	3	-.0184(1)	.9435(3)	.5730(5)	7.9(2)	7.8(3)	6.3(3)	-3.0(2)	-2.7(2)	.3(2)
C	4	-.0639(1)	.9160(4)	.4951(6)	6.7(3)	4.5(3)	2.6(3)	-.2(2)	-.7(2)	-.1(2)
C	5	-.0830(1)	.8366(4)	.4694(5)	4.7(2)	4.3(3)	3.0(3)	.4(2)	.3(2)	.4(2)
O	5	-.1087(1)	.8673(3)	.4328(5)	4.4(2)	4.8(2)	7.0(3)	.9(2)	-.4(2)	.4(2)
H	05	-.119 (1)	.805 (5)	.418 (7)	7. (2)					
C	6	-.0779(1)	.7090(4)	.4814(5)	3.8(2)	4.6(3)	2.2(3)	.3(2)	-.0(2)	-.0(2)
O	6	-.0976(1)	.6443(3)	.4696(4)	3.3(1)	4.8(2)	6.3(2)	-.1(1)	.2(2)	.1(2)
C	7	-.0444(1)	.5365(4)	.4882(5)	3.8(2)	6.0(3)	2.9(3)	1.4(2)	-.3(2)	.2(3)
H	71	-.061 (1)	.503 (3)	.460 (4)	2. (1)					
C	8	-.0368(1)	.4730(5)	.6382(6)	4.4(3)	5.9(3)	4.9(4)	.9(2)	-.2(2)	.9(3)
O	081	-.0085(1)	.5043(4)	.6635(6)	6.0(2)	10.8(4)	6.5(3)	-.2(2)	-2.6(2)	3.4(3)
H	081	-.005 (1)	.488 (5)	.759 (8)	8. (2)					
C	082	-.0386(1)	.3427(5)	.6184(8)	7.7(4)	6.8(4)	5.8(4)	1.8(3)	1.0(3)	1.5(3)
H	084	-.057 (1)	.322 (5)	.608 (7)	8. (2)					
H	085	-.031 (1)	.301 (5)	.712 (6)	9. (2)					
H	086	-.029 (1)	.320 (5)	.526 (6)	9. (2)					
C	083	-.0543(1)	.5105(6)	.7737(7)	9.8(5)	8.3(5)	3.7(4)	1.5(4)	-.3(3)	-.5(3)
H	087	-.049 (1)	.593 (5)	.806 (6)	7. (2)					
H	088	-.071 (1)	.505 (4)	.739 (5)	5. (1)					

SECOTRIDENTOCHINON

TABELLE B5: ATOMPARAMETER(STANDARDABWEICHUNGEN IN KLAMMERN) BLATT 2

H	089	-.045 (1)	.463 (6)	.885 (9)	18. (3)					
C	9	-.0240(1)	.5161(5)	.3582(7)	5.7(3)	7.0(4)	4.5(4)	2.5(3)	.7(3)	.9(3)
H	91	-.014 (1)	.438 (5)	.357 (6)	8. (2)					
H	92	-.008 (1)	.570 (4)	.378 (5)	5. (1)					
C	10	-.0350(1)	.5308(6)	.1961(8)	9.3(5)	6.0(4)	4.1(4)	1.6(4)	1.1(4)	.4(3)
H	101	-.048 (1)	.481 (4)	.190 (6)	5. (2)					
H	102	-.020 (1)	.503 (5)	.115 (7)	8. (2)					
C	11	-.0444(1)	.6501(4)	.1532(6)	6.1(3)	5.3(3)	2.9(3)	.1(2)	.5(2)	.4(3)
C	111	-.0228(2)	.7431(8)	.148 (1)	7.3(4)	11.1(6)	7.7(6)	-1.8(4)	-1.4(4)	4.4(5)
H	111	-.031 (2)	.806 (7)	.08 (1)	16. (3)					
H	112	-.010 (1)	.724 (5)	.227 (6)	6. (2)					
H	113	-.012 (1)	.729 (7)	.062 (9)	12. (3)					
C	12	-.0700(1)	.6736(5)	.1217(7)	6.3(3)	6.2(4)	3.9(4)	-.8(3)	-.8(3)	-.2(3)
H	121	-.080 (1)	.614 (4)	.120 (6)	5. (2)					
C	13	-.0818(1)	.7889(5)	.0812(7)	8.3(4)	7.7(4)	4.3(4)	2.9(3)	.1(3)	.4(3)
H	131	-.098 (1)	.801 (5)	.121 (7)	7. (2)					
H	132	-.071 (1)	.857 (6)	.152 (8)	13. (3)					
C	14	-.0788(1)	.8227(5)	-.0882(7)	9.9(5)	6.4(4)	3.6(4)	1.6(4)	-.7(4)	-.0(3)
H	141	-.059 (1)	.825 (5)	-.123 (7)	8. (2)					
H	142	-.091 (1)	.774 (5)	-.155 (8)	10. (2)					
C	15	-.0880(1)	.9466(5)	-.1086(7)	8.1(4)	7.7(4)	3.7(4)	1.0(3)	-.4(3)	.2(3)
C	151	-.1173(2)	.9649(9)	-.146 (2)	9.0(5)	7.9(6)	11.3(8)	2.2(5)	-1.8(6)	-.6(6)
H	151	-.123 (1)	1.045 (6)	-.133 (7)	8. (2)					
H	152	-.125 (2)	.93 (1)	-.19 (1)	19. (6)					
H	153	-.129 (1)	.947 (7)	-.052 (9)	11. (3)					
C	16	-.0707(1)	1.0304(6)	-.0807(8)	7.9(4)	8.3(5)	4.8(4)	1.1(4)	.3(3)	1.0(4)
H	161	-.053 (1)	1.013 (6)	-.055 (8)	11. (3)					
C	17	-.0762(1)	1.1590(6)	-.0625(8)	11.5(5)	7.4(5)	6.0(5)	-.8(4)	.5(4)	1.7(4)

SECOTRIDENTOCHINON

TABELLE B5 : ATOMPARAMETER(STANDARDABWEICHUNGEN IN KLAMMERN) BLATT 3

H	171	-.067 (1)	1.194 (4)	-.141 (6)	5. (2)					
H	172	-.096 (1)	1.175 (6)	-.066 (8)	15. (3)					
C	18	-.0652(2)	1.2056(6)	.0912(9)	11.2(6)	5.0(5)	7.8(5)	-1.2(4)	.2(5)	1.7(4)
H	181	-.046 (1)	1.205 (4)	.083 (6)	6. (2)					
H	182	-.069 (1)	1.289 (5)	.088 (7)	8. (2)					
C	19	-.0767(1)	1.1479(5)	.2328(7)	8.3(4)	4.3(3)	5.4(4)	-.0(3)	-.6(3)	.0(3)
C	191	-.1077(2)	1.1518(9)	.244 (1)	9.3(5)	15.0(8)	7.2(6)	5.1(5)	1.0(5)	5.0(6)
H	191	-.112 (1)	1.119 (5)	.344 (7)	8. (2)					
H	192	-.113 (2)	1.124 (9)	.14 (1)	18. (5)					
H	193	-.113 (1)	1.228 (7)	.22 (1)	18. (3)					
C	20	-.0608(1)	1.0985(5)	.3350(7)	7.3(4)	4.8(3)	5.2(4)	-1.6(3)	-.4(3)	-.0(3)
H	201	-.041 (1)	1.100 (4)	.310 (6)	7. (2)					
C	21	-.0693(1)	1.0461(5)	.4850(8)	9.8(4)	4.5(3)	4.9(4)	-.3(3)	-1.1(4)	-.6(3)
H	211	-.062 (1)	1.077 (5)	.564 (6)	6. (2)					
H	212	-.090 (1)	1.050 (7)	.517 (9)	19. (3)					
C	51	-.8016(1)	.3236(4)	.9620(6)	3.5(2)	4.0(3)	3.7(3)	-.4(2)	-.2(2)	.2(2)
C	52	-.7884(1)	.3425(4)	.8307(6)	4.4(2)	4.7(3)	3.4(3)	-.9(2)	.2(2)	-.1(3)
O	52	-.7661(1)	.4090(3)	.8260(4)	5.7(2)	8.4(3)	5.0(2)	-3.7(2)	1.1(2)	-.1(2)
H	521	-.759 (1)	.413 (4)	.762 (6)	10. (2)					
C	53	-.7975(1)	.2924(4)	.6783(6)	5.0(3)	4.5(3)	4.7(4)	-.6(2)	.3(3)	.5(3)
O	53	-.7831(1)	.3124(4)	.5658(5)	8.8(3)	10.3(3)	4.1(3)	-4.3(2)	1.8(2)	-.5(2)
C	54	-.8228(1)	.2260(4)	.6699(6)	4.3(2)	4.5(3)	4.6(3)	-.4(2)	-.5(2)	.1(3)
C	55	-.8364(1)	.2111(4)	.8012(6)	3.2(2)	4.8(3)	5.2(4)	-.5(2)	-.5(2)	-.5(3)
O	55	-.8603(1)	.1533(3)	.8039(4)	4.2(2)	6.6(2)	5.2(3)	-1.7(2)	.1(2)	-1.2(2)
H	551	-.867 (1)	.152 (5)	.932 (8)	10. (2)					
C	56	-.8273(1)	.2600(4)	.9534(5)	3.0(2)	4.6(3)	4.2(3)	-.0(2)	.4(2)	.3(2)
O	56	-.8425(1)	.2441(3)	1.0633(4)	3.7(2)	6.6(2)	4.8(2)	-1.3(2)	.4(2)	-.4(2)
C	57	-.7930(1)	.3670(4)	1.1190(6)	3.6(2)	5.4(3)	4.0(3)	-.4(2)	-.0(2)	.0(3)

SECOTRIDENTOCHINON

TABELLE B5: ATOMPARAMETER(STANDARDABWEICHUNGEN IN KLAMMERN) BLATT 4

H	571	-.806 (1)	.336 (3)	1.196 (5)	4. (1)					
C	58	-.7954(1)	.5010(4)	1.1398(7)	5.1(3)	4.8(3)	6.5(4)	-1.1(2)	-.3(3)	-.3(3)
O	581	-.7706(1)	.5592(3)	1.0956(4)	7.2(2)	6.0(2)	5.5(3)	-2.7(2)	-.2(2)	.0(2)
H	580	-.766 (1)	.543 (5)	.991 (7)	14. (2)					
C	582	-.7995(1)	.5321(6)	1.3082(8)	7.5(4)	7.5(4)	5.3(5)	-.4(4)	.3(4)	-2.0(4)
H	584	-.789 (1)	.507 (5)	1.393 (7)	8. (2)					
H	585	-.819 (1)	.521 (5)	1.346 (7)	9. (2)					
H	586	-.798 (1)	.624 (5)	1.333 (7)	10. (2)					
C	583	-.8188(1)	.5521(6)	1.0437(9)	7.4(4)	5.6(4)	10.6(6)	1.6(3)	-2.2(4)	-1.5(4)
H	587	-.824 (1)	.626 (5)	1.082 (7)	9. (2)					
H	588	-.838 (1)	.505 (5)	1.093 (8)	10. (2)					
H	589	-.813 (1)	.544 (4)	.931 (6)	9. (2)					
C	59	-.7646(1)	.3217(5)	1.1674(7)	4.1(3)	6.4(4)	5.0(4)	-.5(2)	-.8(3)	-.5(3)
H	591	-.751 (1)	.342 (4)	1.069 (6)	6. (1)					
H	592	-.759 (1)	.365 (4)	1.255 (5)	3. (1)					
C	60	-.7641(1)	.1920(5)	1.2126(8)	6.1(3)	6.7(4)	6.6(5)	.4(3)	-2.0(3)	-.1(3)
H	601	-.745 (1)	.179 (6)	1.250 (8)	13. (3)					
H	602	-.777 (1)	.176 (4)	1.320 (6)	6. (1)					
C	61	-.7709(1)	.1079(5)	1.0883(7)	5.7(3)	5.0(3)	6.2(4)	1.5(2)	-.9(3)	-.1(3)
C	611	-.7522(1)	.1062(6)	.9489(9)	5.6(3)	9.5(5)	11.0(6)	.5(3)	1.5(4)	-3.1(5)
H	611	-.735 (2)	.05 (1)	.97 (1)	24. (5)					
H	612	-.756 (1)	.058 (7)	.889 (9)	13. (3)					
H	613	-.741 (1)	.175 (5)	.926 (8)	10. (2)					
C	62	-.7919(1)	.0365(5)	1.1005(7)	8.3(4)	6.0(4)	5.5(4)	.8(3)	-.4(3)	-.0(3)
H	621	-.804 (1)	.042 (5)	1.208 (7)	13. (2)					
C	63	-.8006(1)	-.0532(7)	.9838(9)	7.4(4)	8.2(5)	7.3(5)	.2(4)	.5(4)	-.8(4)
H	631	-.795 (1)	-.004 (5)	.877 (8)	11. (2)					
H	632	-.787 (1)	-.104 (6)	.975 (8)	10. (3)					

SECOTRIDENTOCHINON

TABELLE B5: ATOMPARAMETER(STANDARDABWEICHUNGEN IN KLAMMERN) BLATT 5

C	64	-.8303(1)	-.0900(7)	1.0018(9)	8.6(4)	6.9(5)	5.5(5)	-1.4(4)	-.1(4)	-.1(4)
H	641	-.840 (1)	-.001 (5)	1.014 (7)	8. (2)					
H	642	-.831 (2)	-.118 (9)	1.10 (1)	21. (5)					
C	65	-.8425(1)	-.1517(5)	.8663(7)	8.5(4)	6.1(4)	5.6(4)	-2.2(3)	.1(3)	.7(3)
C	651	-.8728(2)	-.163 (1)	.875 (1)	10.1(6)	17. (1)	9.7(9)	-5.9(7)	3.6(6)	-4.1(9)
H	651	-.879 (2)	-.239 (7)	.86 (1)	13. (3)					
H	652	-.880 (1)	-.147 (5)	.948 (6)	4. (2)					
H	653	-.878 (2)	-.104 (8)	.80 (1)	24. (5)					
C	66	-.8284(1)	-.1864(5)	.7465(8)	7.4(4)	6.2(4)	8.0(5)	-.5(3)	-.4(4)	-.8(4)
H	661	-.808 (1)	-.175 (4)	.725 (6)	8. (2)					
C	67	-.8383(1)	-.2376(6)	.5976(9)	8.3(5)	6.5(4)	8.2(5)	-1.0(4)	-.3(4)	-2.1(4)
H	671	-.858 (1)	-.248 (4)	.598 (5)	5. (1)					
H	672	-.831 (1)	-.314 (5)	.562 (8)	10. (2)					
C	68	-.8299(1)	-.1596(5)	.4603(8)	7.0(4)	6.5(4)	6.9(5)	-.9(3)	.1(4)	-2.3(4)
H	681	-.809 (1)	-.159 (4)	.451 (5)	5. (1)					
H	682	-.837 (1)	-.195 (5)	.373 (7)	8. (2)					
C	69	-.8407(1)	-.0376(5)	.4700(7)	5.4(3)	6.7(4)	5.1(4)	.4(3)	-.0(3)	-2.0(3)
C	691	-.8707(2)	-.025 (1)	.447 (2)	8.4(5)	7.5(7)	18. (1)	.1(5)	-5.0(7)	-2.8(8)
H	691	-.877 (1)	.044 (7)	.45 (1)	12. (3)					
H	692	-.872 (2)	-.006 (9)	.35 (1)	19. (5)					
H	693	-.879 (2)	-.084 (7)	.46 (1)	11. (4)					
C	70	-.8243(1)	.0502(5)	.5013(6)	4.7(3)	6.6(4)	4.4(4)	-.1(3)	.2(3)	-.9(3)
H	701	-.806 (1)	.032 (4)	.517 (5)	5. (1)					
C	71	-.8320(1)	.1766(5)	.5183(7)	5.8(3)	7.0(4)	4.6(4)	-.5(3)	-.7(3)	-.4(3)
H	711	-.851 (1)	.182 (4)	.509 (5)	4. (1)					
H	712	-.823 (1)	.217 (4)	.430 (5)	4. (1)					

Die Nummern der Atome des Moleküls II sind gegenüber den Nummern der Atome des Moleküls I um 50 bzw. 500 erhöht.

Tabelle B 6: Beobachtete und berechnete Strukturfaktoren des Secotridentochinons

	H•0•0	
6	101	107
8	2066	2098
10	538	540
12	734	747
14	42*	8
16	345	342
18	584	583
20	716	712
22	755	764
24	978	967
26	252	243
28	45*	50
30	846	834
32	758	764
34	128	115
36	208	199
38	50*	74
40	49*	9
42	160	169
44	101	102
46	74	62
48	49*	28
50	71	63
52	47*	59
54	160	154
56	44*	46
58	43*	53

	H•1•0	
3	118	106
4	40*	35
5	1092	1074
6	1638	1652
7	1842	1857
8	800	812
9	2150	2152
10	988	974
11	247	242
12	144	154
13	671	674
14	1189	1195
15	506	510
16	444	449
17	722	728
18	275	279
19	517	515
20	319	320
21	233	222
22	171	164
23	125	119
24	118	123
25	951	932
26	388	401
27	74	70
28	64	45
29	43*	40
30	477	466
31	99	96
32	166	168
33	469	477
34	126	132
35	142	154
36	46*	7
37	115	126
38	46*	3
39	141	143
40	194	191
41	109	97
42	48*	32
43	222	216
44	162	155
45	90	105
46	90	84
47	48*	53
48	69	40
49	47*	28
50	48*	65
51	47*	13
52	186	170
53	104	105
54	46*	27
55	45*	6
56	44*	31
57	43*	1
58	43*	18
59	42*	21

	H•2•0	
0	273	254
1	249	247
2	367	394
3	917	944
4	1065	1068
5	888	893
6	301	313
7	335	325
8	237	240
9	799	804
10	301	301
11	41*	27
12	1586	1591
13	629	630
14	102	94
15	298	313
16	717	717
17	659	640
18	197	210
19	115	119
21	632	662
22	41*	62
23	70	61
24	393	401
25	687	688
26	69	52
27	353	351
28	237	226
29	65	60
30	69	71
31	108	109
32	63	44
33	244	239
34	103	120
35	87	93
53	44*	5
54	71	65
55	111	99
56	44*	15
57	43*	18
58	42*	9
59	84	67

	H•3•0	
1	153	144
2	796	825
3	182	205
4	865	857
5	1327	1340
6	414	413
7	215	219
8	455	449
9	702	700
10	934	935
11	1163	1170
12	59	44

	H.3.0	
13	594	596
14	354	342
15	423	423
16	256	255
17	192	190
18	285	272
19	301	284
20	279	266
21	301	307
22	439	428
23	477	468
24	287	265
25	173	160
26	86	97
27	43*	59
28	138	142
29	361	357
30	129	131
31	68	84
32	187	175
33	81	98
34	46*	15
35	67	51
36	47*	59
37	46*	5
38	84	70
39	399	386
40	213	209
41	178	184
42	233	254
43	91	93
44	49*	18
45	296	296
46	164	163
47	49*	57
48	48*	43
49	48*	8
50	74	64
51	47*	23
52	93	69
53	45*	5
54	44*	44
55	44*	7
56	44*	48
57	67	55
58	41*	16

	H.4.0	
0	447	452
1	275	283
2	623	642
3	669	679
4	498	528
5	970	964
6	1716	1711
7	1086	1092
8	320	326
9	187	173
10	137	155
11	156	167
12	232	223
13	455	465
14	204	226
15	41*	26
16	41*	43
17	253	240
18	41*	42
19	97	88
20	304	277
21	142	144
22	294	278
23	196	188
24	287	292
25	83	86
26	44*	40
27	142	131
28	287	281
29	45*	39
30	45*	16
31	159	147
32	230	218
33	141	156
34	113	118
35	148	150
36	47*	7
37	83	81
38	70	73
39	97	89
40	130	131
41	48*	52
42	85	112
43	177	199
44	91	103
45	77	89
46	48*	27
47	85	78
48	140	184
49	47*	25
50	81	64
51	46*	2
52	96	98
53	44*	10
54	44*	23
55	43*	44
56	43*	19
57	41*	3

	H.5.0	
1	222	224
2	229	226
3	696	689
4	194	200
5	153	130
6	119	117
7	841	824
8	1068	1056
9	954	945
10	121	121
11	265	257
12	718	701
13	329	343
14	598	582
15	281	264
16	62	60
17	185	180
18	371	359
19	479	477
20	298	281
21	43*	9
22	437	435
23	254	241
24	45*	52
25	71	52
26	81	66
27	88	96
28	169	169
29	47*	65
30	142	141
31	211	213
32	238	238
33	169	165
34	48*	47
35	49*	71
36	75	83
37	48*	49

H,5,0

38	48*	11
39	262	269
40	48*	27
41	75	83
42	130	135
43	73	42
44	168	156
45	47*	25
46	47*	25
47	47*	3
48	47*	68
49	46*	40
50	45*	11
51	44*	2
52	44*	25
53	43*	1
54	117	104
55	41*	28

H,6,0

0	1107	1091
1	291	282
2	272	277
3	41*	53
4	240	247
5	533	538
6	407	403
7	156	164
8	395	379
9	316	307
10	235	243
11	63	71
12	508	509
13	41*	6
14	278	273
15	43*	53
16	42*	37
17	431	439
18	281	283
19	44*	60
20	287	280
21	147	150
22	45*	42
23	72	83
24	439	443
25	110	111
26	46*	4
27	188	194
28	187	181
29	329	343
30	49*	33
31	112	120
32	303	319
33	74	55
34	141	140
35	99	95
36	48*	2
37	49*	12
38	144	134
39	130	116
40	48*	5
41	96	112
42	171	183
43	90	83
44	90	93
45	47*	18
46	46*	21
47	46*	52
48	45*	26
49	44*	35
50	44*	9
51	44*	63
52	43*	42
53	42*	18

H,7,0

1	70	38
2	65	45
3	337	352
4	183	186
5	403	406
6	102	93
7	43*	48
8	269	266
9	417	419
10	106	110
11	83	80
12	43*	12
13	216	212
14	192	202
15	44*	39
16	253	260
17	45*	25
18	162	161
19	45*	45
20	47*	57
21	149	136
22	66	48
23	600	591
24	210	218
25	48*	26
26	143	157
27	48*	14
28	81	90
29	289	287
30	49*	32
31	155	147
32	251	248
33	127	130
34	190	193
35	108	99
36	132	134
37	49*	81
38	49*	69
39	197	210
40	183	181
41	80	72
42	47*	6
43	46*	7
44	101	95
45	46*	11
46	70	36
47	44*	11
48	43*	29
49	43*	4
50	42*	22
51	41*	10

H,8,0

0	198	201
1	68	81
2	271	266
3	88	84
4	108	109
5	134	127
6	249	249
7	272	279
8	307	311
9	132	134
10	46*	10
11	46*	57
12	182	198
13	47*	47
14	221	237

H,8,0

15	67	73
16	199	196
17	69	26
18	47*	24
19	84	71
20	325	323
21	229	231
22	175	179
23	48*	30
24	49*	28
25	197	196
26	49*	44
27	49*	48
28	185	190
29	165	162
30	50*	2
31	74	102
32	134	142
33	161	167
34	49*	68
35	49*	5
36	48*	8
37	168	167
38	101	86
39	48*	58
40	47*	13
41	161	165
42	47*	87
43	91	98
44	45*	32
45	44*	38
46	90	84
47	43*	11
48	42*	17
49	42*	45

H,9,0

1	106	96
2	47*	63
3	48*	63
4	72	83
5	187	181
6	47*	20
7	176	187
8	231	236
9	91	79
10	169	190
11	48*	61
12	333	333
13	243	229
14	99	92
15	307	304
16	189	186
17	241	270
18	277	276
19	222	231
20	74	79
21	86	107
22	48*	20
23	49*	49
24	276	275
25	125	127
26	148	152
27	145	159
28	117	110
29	49*	54
30	49*	49
31	130	148
32	169	175
33	47*	9
34	47*	5
35	47*	60
36	46*	34
37	45*	26
38	45*	4
39	87	94
40	44*	22
41	71	74
42	43*	8
43	42*	39
44	41*	19
45	41*	56

H,10,0

0	372	381
1	149	164
2	96	93
3	46*	9
4	216	223

H,0,1

1	285	340
2	896	961
3	397	420
4	54*	5
5	411	424
6	1636	1687
7	1461	1474
8	137	140
9	518	529
10	1631	1643
11	183	185
12	482	467
13	284	282
14	274	293
15	243	249
16	351	343
17	215	222
18	441	429
19	175	185
20	163	153
21	44*	62
22	946	949
23	834	842
24	243	242
25	42*	14
26	254	261
27	60	63
28	99	95
29	43*	48
30	217	205
31	68	13
32	247	246
33	67	90
34	82	72
35	46*	51
36	242	228
37	48*	18
38	48*	51
39	314	331
40	343	353
41	50*	54
42	49*	65
43	88	74
44	50*	65
45	112	123
46	49*	15
47	119	137
48	49*	48
49	49*	50
50	48*	3
51	48*	35
52	71	57
53	75	49

H.0.1

54	95	89
55	46*	33
56	46*	27
57	86	76
58	43*	1
59	43*	19

H.1.1

0	1684	1647
1	275	286
2	496	490
3	631	647
4	361	363
5	512	535
6	182	186
7	163	166
8	348	353
9	733	744
10	479	487
11	200	197
12	625	635
13	389	373
14	508	532
15	296	305
16	76	55
17	715	706
18	182	189
19	390	388
20	706	703
21	325	308
22	502	490
23	435	415
24	151	157
25	380	387
26	217	215
28	44*	54
29	171	172
30	411	415
31	118	116
32	169	170
33	99	68
34	46*	44
35	83	80
36	184	173
37	272	272
39	49*	71
40	155	163
41	264	266
42	89	85
43	49*	64
44	49*	56
45	95	100
46	114	119
47	127	123
48	143	134
49	50*	42
50	49*	49
51	48*	39
52	73	59
53	47*	15
54	94	91
55	46*	67
56	45*	9
57	71	66
58	43*	20
59	42*	29

H.2.1

0	1833	1817
1	183	178
2	111	106
3	1417	1404
4	527	532
5	1229	1218
6	1662	1651
7	960	951
8	585	599
9	360	373
10	93	99
11	486	478
12	470	489
13	485	488
14	248	252
15	224	226
16	381	386
17	540	521
18	378	367
19	284	295
20	410	404
21	380	357
22	183	161
23	751	718
24	145	149
25	290	267
26	438	426
27	218	204
28	218	214
29	328	307
30	178	172
31	348	348
32	46*	25
33	181	186
34	139	144
35	221	232
36	255	252
37	48*	67
38	170	152
39	50*	76
40	203	205
41	77	60
42	228	214
43	148	155
44	51*	59
45	294	295
46	126	124
47	117	111
48	50*	32
49	117	92
50	189	177
51	48*	48
52	99	93
53	103	81
54	46*	40
55	45*	24
56	76	78
57	44*	20
58	43*	48

H.3.1

0	292	318
1	602	607
2	898	899
3	43*	6
4	552	572
5	644	654
6	1428	1416
7	469	480
8	1001	991
9	434	421
10	283	283
11	459	450
12	651	649
13	713	691
14	229	215

H.3.1

15	97	100
16	182	198
17	212	195
18	390	381
19	279	278
20	255	236
21	104	115
22	273	267
23	281	287
24	296	277
25	348	330
26	404	390
27	218	216
28	105	102
29	297	293
30	184	197
31	222	221
32	154	149
33	198	197
34	222	240
35	253	253
36	145	152
37	117	123
38	129	147
39	231	250
40	49*	47
41	112	126
42	75	81
43	50*	39
44	108	95
45	95	94
46	49*	24
47	171	197
48	168	173
49	48*	48
50	48*	44
51	107	99
52	47*	26
53	73	54
54	45*	47
55	77	30
56	43*	24
57	43*	24
58	42*	55

H.4.1

0	271	271
1	603	595
2	741	739
3	244	241
4	268	260
5	269	264
6	352	357
7	337	349
8	749	732
9	178	182
10	285	297
11	573	579
12	96	97
13	222	231
14	229	217
15	332	326
16	362	351
17	665	657
18	162	142
19	361	348
20	180	186
21	151	155
22	326	307
23	201	185
24	214	203
25	178	174
26	143	150
27	235	224
28	239	238
29	83	63
30	145	145
31	83	72
32	84	87
33	111	123
34	189	203
35	123	124
36	89	99
37	50*	57
38	50*	33
39	50*	40
40	124	114
41	51*	68
42	109	118
43	210	215
44	116	105
45	50*	26
46	115	106
47	72	39
48	111	101
49	130	128
50	48*	34
51	94	78
52	47*	28
53	46*	23
54	87	51
55	44*	27
56	43*	34

H.5.1

0	355	349
1	918	883
2	478	466
3	785	763
4	308	281
5	290	269
6	843	813
7	548	537
8	347	326
9	132	131
10	783	775
11	207	208
12	43*	40
13	274	270
14	483	494
15	479	473
16	302	295
17	132	118
18	302	296
19	262	265
20	118	114
21	45*	58
22	438	440
23	168	176
24	296	298
25	46*	71
26	286	285
27	417	425
28	88	93
29	139	146
30	108	94
31	88	93
32	285	294
33	50*	58
34	257	265
35	186	192
36	169	156
37	121	134
38	51*	79
39	104	94

H,5,1

40	104	120
41	147	145
42	49*	61
43	81	62
44	71	89
45	49*	36
46	92	75
47	49*	46
48	48*	17
49	48*	69
50	46*	22
52	45*	25
53	63	31
54	43*	39
55	43*	3

H,6,1

0	383	380
1	432	419
2	318	319
3	281	259
4	214	229
5	116	106
6	266	272
7	289	294
8	169	167
9	175	173
10	422	426
11	129	122
12	538	529
13	157	170
14	277	278
15	363	372
16	216	207
17	265	255
18	532	538
19	201	205
21	102	117
22	247	240
23	340	343
24	96	92
25	184	180
26	182	198
27	339	356
28	49*	15
29	278	278
30	75	56
31	74	82
32	214	216
33	50*	44
34	124	116
35	74	65
36	51*	75
37	162	160
38	117	97
39	316	313
40	72	73
41	50*	12
42	49*	60
43	49*	73
44	49*	56
45	47*	48
46	48*	57
47	47*	62
48	46*	44
49	45*	68
50	44*	26
51	78	90
52	95	66
53	42*	39

H,7,1

0	341	341
1	43*	33
2	250	239
3	106	91
4	71	52
5	359	353
6	43*	35
7	200	205
8	208	205
9	224	222
10	270	276
11	215	219
12	154	155
13	168	173
14	172	174
15	275	285
16	288	298
17	229	229
18	144	145
19	144	147
20	134	142
21	214	222
22	171	177
23	116	139
24	102	118
25	383	388
26	207	193
27	85	58
28	224	235
29	97	82
30	195	185
31	177	162
32	114	134
33	102	77
34	103	96
35	223	213
36	109	79
37	171	171
38	80	80
39	87	57
40	118	102
41	77	84
42	137	127
43	95	78
44	48*	34
45	96	100
46	76	69
47	70	61
48	45*	65
49	45*	55
50	43*	56
51	95	84

H,8,1

0	214	216
1	103	98
2	314	317
3	149	158
4	46*	27
5	176	183
6	175	182
7	72	62
8	167	165
9	47*	72
10	163	152
11	99	111
12	139	118
13	167	176
14	249	256
15	222	232
16	188	199
17	245	246

H,8,1

18	212	217
19	151	158
20	136	153
21	188	186
22	180	187
23	275	277
24	222	247
25	146	137
26	102	125
27	207	212
28	159	160
29	127	113
30	114	112
31	51*	21
32	51*	79
33	89	88
34	117	134
35	51*	81
36	95	98
37	110	114
38	50*	66
39	109	113
40	77	77
41	103	114
42	80	68
43	86	62
44	46*	13
45	87	86
46	45*	25
47	79	62
48	43*	23

H,9,1

0	343	358
1	83	88
2	131	126
3	75	79
4	189	204
5	231	231
6	161	167
7	150	138
8	49*	22
9	49*	72
10	158	169
11	166	188
12	92	77
13	300	297
14	50*	74
15	50*	67
16	298	296
17	212	217
18	73	89
19	206	205
20	229	240
21	146	136
22	51*	77
23	80	96
24	129	130
25	50*	36
26	140	125
27	51*	55
28	52*	37
29	85	85
30	51*	40
31	52*	65
32	77	63
33	131	114
34	119	121
35	88	97
36	48*	43
37	48*	30
38	94	89
39	47*	18
40	46*	39
41	45*	9
42	45*	28
43	91	90
44	43*	12
45	61	15

H,10,1

0	50*	72
1	122	118
2	145	150
3	50*	37
4	50*	47
5	50*	57
6	77	63
7	50*	40
8	50*	56
9	49*	28
10	90	91
11	162	160
12	140	136
13	50*	25
14	51*	63
15	145	149
16	75	53
17	113	118
18	184	190
19	51*	50
20	51*	31
21	77	86
22	51*	54
23	83	64
24	51*	13
25	96	85
26	96	86
27	144	141
28	51*	36
29	125	142
30	50*	37
31	50*	30
32	48*	15
33	87	89
34	47*	58
35	47*	30
36	46*	30
37	46*	4
38	45*	42
39	44*	37
40	43*	28
41	43*	44

H,0,2

0	2438	2453
1	630	651
2	283	314
3	713	755
4	710	742
5	221	228
6	36*	27
7	1247	1259
8	1286	1313
9	1700	1725
10	53	49
11	363	367
12	956	966
13	282	277
14	129	137
15	145	132
16	271	289
17	633	639
18	208	193

H,0,2

19	326	325
20	338	344
21	169	160
22	178	179
23	37*	33
24	466	457
25	276	284
26	37*	39
27	81	70
28	84	83
29	210	210
30	67	40
31	304	306
32	205	208
33	509	513
34	288	281
35	40*	6
36	41*	30
37	271	264
38	108	105
39	42*	3
40	279	275
41	64	72
42	100	109
43	162	165
44	42*	7
45	97	102
46	95	98
47	42*	51
48	42*	13
49	41*	4
50	41*	21
51	41*	15
52	80	68
53	40*	23
54	79	67
55	39*	37
56	55	36
57	38*	59
58	36*	20

H,1,2

0	1780	1790
1	724	739
2	995	993
3	1405	1398
4	1143	1168
5	941	955
6	347	335
7	611	615
8	274	261
9	305	325
10	534	515
11	206	201
12	592	606
13	341	347
14	277	276
15	457	443
16	332	331
17	494	496
18	458	441
19	357	357
20	226	228
21	153	147
22	262	271
23	286	283
24	477	474
25	398	395
26	334	329
27	174	176
28	371	372
29	253	275
30	35*	109
31	95	87
32	60	74
33	144	146
34	40*	57
35	90	99
36	41*	40
37	158	151
38	115	117
39	211	224
40	152	155
41	155	166
42	343	341
43	105	108
44	136	138
45	77	77
46	69	68
47	42*	25
48	42*	22
49	42*	19
50	69	70
51	41*	53
52	63	70
53	96	87
54	88	89
55	39*	41
56	38*	62
57	37*	18
58	37*	49

H,2,2

0	36*	25
1	627	618
2	845	846
3	731	743
4	300	305
5	567	566
6	487	482
7	277	281
8	370	373
9	226	217
10	283	299
11	136	151
12	195	188
13	431	430
14	491	496
15	333	323
16	573	564
17	490	461
18	265	261
19	300	309
20	256	257
21	338	336
22	79	71
23	158	135
24	227	238
25	143	127
26	247	234
27	251	241
28	87	74
29	85	72
30	321	316
31	39*	50
32	169	177
33	229	225
34	134	132
35	181	181
36	277	275
37	195	202
38	202	192
39	261	259
40	90	93
41	188	186

H,2,2

42	70	66
43	181	176
44	190	192
45	133	148
46	154	161
47	42*	54
48	112	103
49	211	200
50	120	131
51	40*	15
52	61	58
53	40*	64
54	39*	48
55	91	79
56	71	54
57	37*	34
58	36*	50

H,3,2

0	737	727
1	394	401
2	316	304
3	416	418
4	546	544
5	674	666
6	75	73
7	483	491
8	194	191
9	344	339
10	305	303
11	574	582
12	324	331
13	540	525
14	405	384
15	64	68
16	59	65
17	435	423
18	136	140
19	462	450
20	117	110
21	276	264
22	391	376
23	369	365
24	171	168
25	188	181
26	143	133
27	128	124
28	129	131
29	88	76
30	157	144
31	57	64
32	140	140
33	100	105
34	134	120
35	116	140
36	135	134
37	195	198
38	109	110
39	42*	47
40	112	109
41	42*	46
42	165	168
43	211	211
44	150	156
45	134	128
46	85	92
47	75	67
48	95	96
49	41*	36
50	65	67
51	172	166
52	40*	54
53	39*	44
54	38*	12
55	38*	66
56	37*	52
57	36*	30

H,4,2

0	79	72
1	432	430
2	307	297
3	391	396
4	243	234
5	351	355
6	835	815
7	349	322
8	176	163
9	295	306
10	641	615
11	502	493
12	554	547
13	349	347
14	478	478
15	237	234
16	83	87
17	214	229
18	405	386
19	495	493
20	315	299
21	120	108
22	248	251
23	328	327
24	38*	13
25	39*	40
26	253	258
27	339	349
28	67	47
29	40*	45
30	72	73
31	208	215
32	165	157
33	61	88
34	100	107
35	41*	28
36	42*	60
37	197	198
38	178	184
39	118	114
40	64	51
41	156	159
42	169	175
43	42*	76
44	71	81
45	67	84
46	89	76
47	68	51
48	41*	49
49	102	97
50	75	55
51	39*	55
52	39*	19
53	73	75
54	90	74
55	37*	57
56	54	36

H,5,2

0	546	548
1	450	438
2	469	468
3	301	288
4	466	457
5	326	326

	H,5,2	
6	111	120
7	170	160
8	626	626
9	291	284
10	215	214
11	290	286
12	151	159
13	382	369
14	228	237
15	507	516
16	125	128
17	296	303
18	88	103
19	207	202
20	118	120
21	201	192
22	213	208
23	156	167
28	64	66
29	63	61
30	214	232
31	105	103
32	175	168
33	99	98
34	93	88
35	100	95
36	142	156
37	115	112
38	43*	32
39	115	110
40	128	127
41	42*	46
42	42*	51
43	42*	49
44	42*	51
45	134	130
46	89	69
47	72	66
48	67	74
49	40*	34
50	39*	32
51	59	63
52	55	62
53	53	54
54	89	81

	H,6,2	
0	325	329
1	315	319
2	93	94
3	220	203
4	196	179
5	341	348
6	298	304
7	389	385
8	113	117
9	363	357
10	216	210
11	236	218
12	125	127
13	317	323
14	65	48
15	154	143
16	38*	54
17	325	325
18	39*	40
19	85	63
20	116	101
21	108	117
22	85	78
23	115	117
24	90	94
25	61	54
26	125	124
27	383	383
28	174	170
29	199	196
30	205	205
31	199	202
32	105	87
33	333	331
34	173	167
35	42*	54
36	128	137
36	92	137
38	112	128
39	42*	23
40	103	105
41	42*	26
42	98	101
43	125	126
44	61	71
45	40*	49
46	40*	18
47	39*	55
48	38*	16
49	38*	50
50	37*	18
51	37*	33
52	51	40

	H,7,2	
0	406	429
1	264	261
2	162	166
4	185	195
5	108	104
6	93	104
7	61	71
8	122	109
9	192	182
10	219	217
11	134	132
12	219	229
13	153	140
14	63	31
15	138	126
16	60	70
17	82	88
18	133	144
19	206	206
20	42*	28
21	42*	14
22	124	120
23	151	152
24	228	236
25	191	189
26	205	203
27	214	210
28	138	137
29	127	117
30	84	87
31	98	85
32	218	222
33	108	132
34	208	212
35	67	62
36	104	114
37	111	109
38	64	75
39	131	139
40	151	134
41	77	85
42	127	127
43	79	68

H.7.2

44	58	30
45	41*	52
46	40*	27
47	39*	64
48	39*	21
49	38*	34
50	37*	44

H.8.2

0	230	243
1	41*	9
2	160	154
3	103	86
4	129	122
5	137	155
6	122	116
7	119	137
8	371	370
9	307	303
10	72	69
11	42*	47
12	121	124
13	106	95
14	256	264
15	150	146
16	220	233
17	274	273
18	161	173
19	184	186
20	193	199
21	279	273
22	72	55
23	136	132
24	65	71
25	204	215
26	66	61
27	116	113
28	117	109
29	109	115
30	165	159
31	44*	21
32	122	123
33	94	91
34	150	143
35	131	135
36	67	66
37	149	151
38	43*	45
39	66	60
40	79	44
41	60	72
42	40*	17
43	128	117
44	39*	22
45	73	68
46	38*	34
47	37*	47

H.9.2

0	245	249
1	62	69
2	43*	39
3	143	149
4	155	150
5	125	116
6	210	214
7	193	169
8	148	140
9	126	110
10	302	315
11	43*	61
12	214	219
13	75	87
14	149	145
15	186	189
16	214	195
17	295	292
18	129	124
19	158	151
20	266	276
21	44*	45
22	204	213
23	86	89
24	86	72
25	145	145
26	176	185
27	43*	44
28	44*	38
29	44*	54
30	43*	19
31	44*	32
32	43*	35
33	42*	9
34	42*	21
35	42*	22
36	41*	22
37	41*	13
38	41*	67
39	81	73
40	57	50
41	74	86
42	38*	25
43	38*	48
44	37*	25

H.10.2

0	289	288
1	43*	18
2	43*	46
3	75	83
4	106	120
5	81	97
6	128	106
7	225	242
8	124	111
9	120	123
10	118	128
11	139	140
12	90	105
13	107	119
14	183	187
15	179	177
16	44*	42
17	90	97
18	127	130
19	91	82
20	129	145
21	44*	41
22	78	99
23	83	58
24	43*	12
25	44*	20
26	44*	67
27	87	79
28	109	106
29	43*	27
30	75	90
31	42*	9
32	41*	54
33	41*	44
34	86	74
35	40*	25
36	101	82
37	55	37

H,10,2

38	38*	35
39	38*	50
40	37*	25

H,0,3

1	252	248
2	733	731
3	1013	1030
4	1493	1524
5	177	181
6	562	566
7	240	243
8	213	224
9	225	237
10	1096	1094
11	154	158
12	673	693
13	303	304
14	801	779
15	167	185
16	37*	40
17	313	319
18	383	383
19	304	305
20	245	239
21	37*	22
22	144	130
23	238	229
24	155	156
25	358	370
26	196	198
27	268	272
28	244	223
29	95	85
30	74	58
31	78	71
32	40*	5
33	123	118
34	190	211
35	42*	52
36	43*	45
37	43*	41
38	262	268
39	227	238
40	180	183
41	213	215
42	200	208
43	226	226
44	235	239
45	44*	24
46	222	228
47	43*	11
48	68	65
49	91	97
50	42*	5
51	42*	59
52	40*	4
53	40*	10
54	39*	2
55	112	120
56	57	39
57	37*	12

H,1,3

0	946	956
1	656	660
2	1464	1437
3	1084	1074
4	651	637
5	456	458
6	324	335
7	1039	1059
8	731	713
9	235	231
10	284	272
11	724	726
12	141	135
13	205	195
14	498	491
15	405	417
16	527	521
17	196	212
18	271	270
19	423	421
20	206	222
21	494	482
22	103	99
23	300	287
24	210	209
25	258	246
26	164	147
27	256	249
28	91	69
29	39*	12
30	141	153
31	118	106
33	41*	59
34	122	130
35	214	217
38	133	120
39	216	217
40	381	392
41	92	105
42	204	219
43	243	243
44	43*	58
45	127	131
46	43*	57
47	126	140
48	43*	76
49	60	50
50	92	88
51	61	52
52	41*	50
53	40*	47
54	39*	22
55	39*	40
56	38*	34
57	59	55

H,2,3

0	325	310
1	271	286
2	217	201
3	221	237
4	372	368
5	901	901
6	378	381
7	192	192
8	202	216
9	561	551
10	264	264
11	428	430
12	649	642
13	102	119
14	453	465
15	127	121
16	498	494
17	539	540
18	118	123
19	268	273
20	149	149
21	185	177
22	384	383

H,2,3

23	247	250
24	202	196
35	152	144
36	233	204
37	534	494
38	280	261
39	147	129
40	269	234
41	48*	49
42	192	172
43	121	110
44	78	77
45	142	134
46	137	125
47	46*	12
48	45*	49
49	90	65
50	128	127
51	109	100
52	74	49
53	42*	49
54	55*	58
55	40*	18
56	64	63

H,3,3

0	285	279
1	316	316
2	806	771
3	422	397
4	411	393
5	473	449
6	551	537
7	422	404
8	421	406
9	560	538
10	715	673
11	469	451
12	177	173
13	430	405
14	243	253
15	220	197
16	114	103
17	237	235
18	296	297
19	101	88
20	419	429
21	108	99
22	231	236
23	131	129
24	79	57
25	230	214
26	272	289
27	198	211
28	92	81
29	158	152
30	147	164
31	325	328
32	396	408
33	255	246
34	277	275
35	343	331
36	71	73
37	126	136
38	111	123
39	140	161
40	277	298
41	115	119
42	116	124
43	195	189
44	43*	59
45	43*	60
46	42*	29
47	62	69
48	119	127
49	153	155
50	116	104
51	82	67
52	40*	50
53	39*	4
54	38*	24
55	37*	53

H,4,3

0	352	355
1	80	70
2	266	266
3	206	210
4	546	540
5	271	266
6	170	125
7	118	122
8	289	282
9	485	499
10	394	396
11	172	176
12	477	478
13	197	152
14	243	233
15	218	205
16	74	61
17	197	198
18	146	131
19	367	348
20	161	150
21	166	167
22	230	239
23	170	159
24	141	143
25	248	252
26	100	108
27	193	205
28	175	187
29	261	260
30	125	124
31	167	163
32	328	332
33	67	75
34	225	227
35	239	245
36	43*	35
37	141	142
38	66	65
39	95	85
40	43*	28
41	43*	56
42	91	84
43	98	90
44	42*	10
45	73	75
47	41*	64
48	109	110
49	40*	48
50	93	98
51	96	105
52	60	44
53	79	67
54	37*	16

H,5,3

0	115	108
1	218	227
2	297	302
3	556	561

H,5,3

4	221	230
5	407	421
6	167	174
7	470	472
8	373	371
9	150	156
10	287	278
11	281	284
12	178	181
13	253	234
14	108	99
15	117	124
16	174	176
17	129	129
18	39*	56
19	112	119
20	269	285
21	211	209
22	131	128
23	237	240
24	41*	46
25	208	216
26	152	156
27	327	320
28	182	173
29	115	117
30	43*	53
31	185	187
32	44*	43
33	81	95
34	173	189
35	147	150
36	171	166
37	43*	37
38	84	71
39	83	84
40	186	183
41	68	59
42	42*	65
43	65	27
44	58	32
45	41*	40
46	41*	42
47	40*	11
48	40*	35
49	76	59
50	38*	9
51	38*	38

H,6,3

52	68	60
53	36*	12
0	415	418
1	180	169
2	285	282
3	361	333
4	517	519
5	196	189
6	141	139
7	305	314
8	396	407
9	161	167
10	149	137
11	275	287
12	139	136
13	250	248
14	251	264
15	66	95
16	163	162
17	40*	51
18	123	121
19	77	70
20	219	232
21	288	293
22	355	358
23	79	66
24	63	51
25	298	297
26	132	131
27	236	245
28	255	264
29	250	260
30	202	199
31	102	97
32	138	129
33	132	138
34	117	130
35	90	89
36	75	80
37	43*	17
38	102	106
39	113	114
40	42*	32
41	42*	51
42	42*	52
43	41*	47
44	64	73
45	41*	52
46	40*	51
47	39*	15
48	39*	58
49	38*	31
50	37*	12
51	64	61

H,7,3

0	57	56
1	280	279
2	229	229
3	203	218
4	233	244
5	205	198
6	142	151
7	299	294
8	117	112
9	40*	44
10	125	131
11	82	81
12	264	275
13	181	181
14	41*	49
15	148	164
16	98	110
17	201	196
18	177	179
19	358	362
20	196	212
21	43*	30
22	157	169
23	73	92
24	207	209
25	80	98
26	276	276
27	276	274
28	159	151
29	201	193
30	44*	62
31	96	89
32	118	122
33	117	119
34	141	147
35	148	141
36	44*	37
37	125	117
38	43*	28

H.7.3

39	43*	47
40	42*	24
41	42*	19
42	42*	56
43	136	123
44	84	90
45	40*	24
46	40*	41
47	39*	20
48	38*	7

H.8.3

0	42*	2
1	184	186
2	95	109
3	193	187
4	226	208
5	187	189
6	144	142
7	340	346
8	189	196
9	240	236
10	43*	75
11	43*	33
12	165	174
13	202	205
14	275	268
15	119	117
16	423	416
17	395	395
18	157	141
19	170	170
20	195	196
21	163	170
22	150	149
23	149	152
24	84	80
25	127	129
26	89	86
27	158	144
28	43*	58
29	138	146
30	43*	43
31	95	86
32	42*	43
33	195	215
34	110	103
35	109	106
36	109	97
37	83	73
38	40*	33
39	59	60
40	39*	6
41	82	81
42	39*	27
43	38*	29
44	37*	13
45	37*	46
46	55	62

H.9.3

0	155	160
1	241	243
2	126	116
3	237	237
4	75	70
5	74	91
6	74	91
7	43*	53
8	184	184
9	195	199
10	231	234
11	194	186
12	116	123
13	107	121
14	383	393
15	110	113
16	381	379
17	82	94
18	145	140
19	158	162
20	120	121
21	178	188
22	173	157
23	44*	27
24	87	79
25	44*	34
26	118	133
27	44*	47
28	44*	75
29	43*	60
30	142	135
31	64	57
32	42*	44
33	42*	22
34	42*	43
35	87	61
36	73	60
37	59	69
38	40*	23
39	39*	4
40	39*	59
41	38*	47

H.10.3

0	43*	26
1	156	161
2	74	73
3	134	136
4	177	173
5	44*	20
6	139	134
7	115	106
8	44*	52
9	159	162
10	128	145
11	72	70
12	89	99
13	44*	6
14	127	145
15	44*	40
16	105	121
17	45*	64
18	66	65
19	127	115
20	64	66
21	149	145
22	44*	74
23	43*	59
24	44*	42
25	44*	57
26	44*	54
27	43*	22
28	72	62
29	42*	13
30	42*	52
31	41*	36
32	40*	17
33	59	50
34	58	47
35	60	57
36	39*	9
37	61	48
38	37*	14

	H.0.4	
0	256	253
1	718	716
2	180	177
3	270	267
4	762	765
5	59	57
6	64	64
7	541	545
8	760	756
9	234	233
10	341	343
11	214	216
12	481	475
13	202	198
14	620	625
15	818	798
16	238	219
17	572	576
18	147	132
19	84	81
20	92	83
21	132	128
22	152	161
23	39*	5
24	40*	39
25	203	209
26	186	179
27	154	149
28	42*	55
29	269	262
30	42*	24
31	115	123
32	160	160
33	196	189
34	148	146
35	175	176
36	250	260
37	180	175
38	92	101
39	190	178
40	195	190
41	171	171
42	66	73
43	45*	8
44	212	207
45	156	165
46	44*	30
47	122	129
48	123	104
49	43*	30
50	42*	16
51	60	18
52	41*	17
53	41*	43
54	40*	48
55	39*	42

	H.1.4	
0	233	248
1	681	679
2	705	717
3	446	454
4	261	259
5	492	489
6	541	554
7	37*	58
8	454	447
9	285	294
10	119	113
11	441	430
12	416	432
13	310	304
14	151	157
15	251	243
16	311	329
17	390	393
18	258	245
19	439	437
20	268	278
21	170	170
22	98	101
23	57	44
24	58	24
25	373	374
26	68	78
27	41*	55
28	41*	35
29	221	246
30	228	222
31	62	50
32	93	108
33	322	310
34	44*	45
35	198	207
36	44*	70
37	230	235
38	207	217
39	152	155
40	104	101
41	103	91
42	45*	48
43	148	169
44	44*	52
45	67	73
46	110	97
47	37*	49
48	74	82
49	86	77
50	115	109
51	42*	29
52	41*	26
53	40*	12
54	40*	23
55	64	58

	H.2.4	
0	37*	8
1	382	343
2	444	425
3	304	308
4	255	240
5	699	689
6	174	172
7	216	224
8	548	525
9	336	323
10	401	383
11	173	165
12	194	180
13	146	150
14	158	137
15	472	478
16	396	388
17	379	359
18	235	212
19	90	83
20	331	324
21	335	328
22	42*	57
23	257	261
24	65	68
25	123	126
26	73	89
27	43*	42
28	43*	47

H,2,4

29	43*	50
30	44*	60
31	462	483
32	387	387
33	158	144
34	206	225
35	494	488
36	167	171
37	189	198
38	156	162
39	156	162
40	118	133
41	176	168
42	44*	19
43	72	80
44	117	100
45	98	117
46	119	100
47	122	112
48	160	157
49	70	60
50	84	58
51	41*	56
52	41*	63
53	40*	38
54	39*	50

H,3,4

0	37*	32
1	168	158
2	288	266
3	294	295
4	527	502
5	87	77
6	185	180
7	131	130
8	331	303
9	214	212
10	437	430
11	38*	46
12	76	74
13	225	209
14	108	95
15	203	195
16	159	172
17	172	165
18	209	189
19	117	102
20	197	194
21	296	291
22	164	163
23	197	195
24	317	315
25	163	154
26	166	168
27	310	310
28	365	361
29	319	309
30	392	389
31	67	47
32	71	55
33	122	127
34	153	151
35	274	276
36	128	124
37	91	67
38	101	99
39	87	90
40	110	81
41	73	70
42	45*	51
43	197	204
44	137	144
45	74	75
46	102	85
47	107	98
48	42*	32
49	94	87
50	124	119
51	66	69
52	78	64
53	39*	33

H,4,4

0	299	291
1	310	297
2	195	194
3	342	341
4	38*	10
5	62	78
6	310	303
7	429	434
8	168	184
9	276	273
10	471	460
11	385	371
12	217	216
13	347	308
14	85	66
15	61	54
16	126	122
17	41*	45
18	152	169
19	180	184
20	257	271
21	221	198
22	114	110
23	195	200
24	99	95
25	82	80
26	213	215
27	249	249
28	168	181
29	67	55
30	73	66
31	146	143
32	135	124
33	333	327
34	184	201
35	45*	21
36	126	115
37	147	156
38	45*	51
39	99	121
40	44*	47
41	45*	66
42	44*	36
43	95	84
44	44*	52
45	138	139
46	43*	46
47	64	48
48	69	71
49	84	75
50	40*	26
51	40*	22
52	39*	16

H,5,4

0	156	144
1	401	391
2	203	203
3	219	233
4	60	61

H.5.4			H.6.4			48	39*	20
						49	39*	20
5	140	146	0	41*	21			
6	221	200	1	152	155		H.7.4	
7	64	76	2	250	236			
8	62	64	3	454	425	0	89	70
9	193	208	4	185	192	1	128	131
10	82	74	5	204	204	2	43*	76
11	338	336	6	149	151	3	120	123
12	265	254	7	145	131	4	199	198
13	201	208	8	82	91	5	103	102
14	147	144	9	295	284	6	128	119
15	123	111	10	41*	33	7	157	146
16	228	235	11	155	136	8	249	248
17	158	139	12	215	211	9	188	179
18	137	133	13	42*	37	10	179	169
19	43*	62	14	81	82	11	125	134
20	179	160	15	207	196	12	105	105
21	84	96	16	142	137	13	215	205
22	251	248	17	148	130	14	82	81
23	181	193	18	97	110	15	84	97
24	76	85	19	212	212	16	189	181
25	313	305	20	191	202	17	177	172
26	194	198	21	107	108	18	88	87
27	80	87	22	223	228	19	78	68
28	119	99	23	193	200	20	220	218
29	240	232	24	300	297	21	297	292
30	325	311	25	283	287	22	397	412
31	253	241	26	189	178	23	490	499
32	191	184	27	288	283	24	220	216
33	131	114	28	258	245	25	132	136
34	72	42	29	369	369	26	145	159
35	134	136	30	87	94	27	201	201
36	44*	30	31	104	66	28	124	121
37	77	48	32	97	110	29	128	120
38	44*	35	33	92	75	30	116	106
39	78	53	34	95	95	31	45*	59
40	44*	54	35	44*	23	32	109	94
41	44*	66	36	166	162	33	45*	60
42	43*	50	37	131	109	34	121	118
43	43*	45	38	44*	24	35	78	88
44	42*	34	39	94	80	36	120	104
45	42*	27	40	106	108	37	119	107
46	96	85	41	43*	4	38	115	118
47	83	75	42	94	79	39	132	140
48	67	51	43	76	75	40	42*	45
49	40*	16	44	90	63	41	67	51
50	39*	12	45	41*	46	42	41*	17
51	39*	26	46	40*	31	43	84	80
			47	40*	46			

H,7,4

44	40*	27
45	99	87
46	39*	10

H,8,4

0	277	274
1	307	299
2	239	248
3	45*	59
4	44*	32
5	44*	46
6	293	300
7	84	88
8	191	203
9	152	153
10	67	46
11	111	124
12	45*	37
13	101	86
14	45*	41
15	87	67
16	88	86
17	169	161
18	164	150
19	132	132
20	114	120
21	302	301
22	192	174
23	104	123
24	110	113
25	143	149
26	67	78
27	133	143
28	121	115
29	85	96
30	79	84
31	91	93
32	155	141
33	44*	54
34	44*	64
35	43*	30
36	79	81
37	137	131
38	42*	55
39	41*	34
40	40*	50
41	40*	37
42	39*	37
43	38*	28

H,9,4

0	208	200
1	44*	41
2	43*	30
3	132	146
4	44*	55
5	92	102
6	111	123
7	129	125
8	279	281
9	237	251
10	44*	26
11	45*	52
12	131	129
13	205	178
14	194	196
15	45*	36
16	183	183
17	160	175
18	81	93
19	138	140
20	188	187
21	191	176
22	46*	53
23	168	166
24	144	140
25	69	96
26	71	75
28	45*	37
29	45*	36
30	44*	13
31	44*	55
32	44*	68
33	43*	56
34	42*	36
35	80	68
36	42*	37
37	60	31
38	40*	7
39	71	33

H,10,4

0	46*	54
1	166	169
2	96	88
3	135	124
4	71	60
5	112	113
6	82	70
7	95	103
8	46*	74
9	102	108
10	97	86
11	45*	34
12	79	88
13	124	139
14	45*	41
15	45*	59
16	92	82
17	66	67
18	115	101
19	123	126
20	45*	10
21	104	103
22	109	99
23	44*	20
24	75	60
25	63	53
26	80	62
27	43*	52
28	42*	27
29	66	44
30	41*	38
31	41*	41
32	40*	18
33	40*	17
34	39*	37
35	63	52

H,0,5

1	84	48
2	463	466
3	531	540
4	832	820
5	648	663
6	60	31
7	289	297
8	395	382
9	225	235
10	617	617
11	260	267
12	635	643
13	359	352

H,0,5

14	105	116
15	268	273
16	281	275
17	183	210
18	225	233
19	144	122
20	212	219
21	183	183
22	43*	20
23	43*	36
24	43*	15
25	180	188
26	44*	20
27	225	221
28	45*	25
29	140	157
30	45*	7
31	46*	31
32	46*	53
33	65	49
34	71	47
35	177	176
36	207	191
37	46*	37
38	95	120
39	92	82
40	213	217
41	263	280
42	46*	43
43	45*	14
44	147	141
45	47*	55
46	68	55
47	44*	41
48	43*	23
49	42*	11
50	41*	29
51	68	67
52	85	99

H,1,5

0	400	403
1	205	255
2	99	115
3	109	111
4	161	170
5	292	287
6	641	638
7	539	532
8	195	224
9	455	456
10	185	226
11	222	216
12	40*	6
13	225	230
14	172	172
15	127	127
16	264	247
17	139	148
18	331	332
19	126	137
20	175	166
21	211	206
22	227	252
23	197	192
24	43*	37
25	43*	40
26	207	198
27	162	173
28	97	89
29	45*	38
30	45*	56
31	151	156
32	252	255
33	266	282
34	210	229
35	45*	34
36	112	112
37	76	90
38	94	93
39	148	120
40	79	54
41	96	93
42	120	111
43	106	99
44	93	84
45	56*	47
46	44*	44
47	65	72
48	86	102
49	43*	59
50	68	73
51	81	53
52	41*	12

H,2,5

0	159	176
1	220	219
2	301	288
3	491	504
4	132	124
5	228	223
6	289	290
7	188	179
8	98	115
9	261	262
10	366	358
11	144	154
12	175	166
13	162	178
14	191	178
15	267	261
16	134	124
17	224	233
18	131	122
19	226	232
20	101	108
21	286	273
22	179	174
23	217	229
24	220	210
25	72	73
26	67	69
27	207	195
28	72	85
29	171	163
30	119	125
31	128	128
32	114	117
33	117	106
34	166	178
35	112	117
36	143	153
37	121	147
38	45*	45
39	106	130
40	77	81
41	130	122
42	44*	9
43	44*	4
44	79	71
45	112	110
46	102	89
47	43*	56
48	138	121

H,2,5

49	114	93
50	79	86
51	40*	46

H,3,5

0	83	83
1	118	110
2	39*	34
3	39*	35
4	183	197
5	371	373
6	40*	54
7	260	255
8	177	179
9	159	164
10	108	117
11	151	150
12	41*	48
13	122	138
14	100	111
15	94	114
16	75	80
17	84	82
18	140	137
19	119	115
20	274	293
21	44*	29
22	138	139
23	183	177
24	45*	38
25	169	176
26	173	172
27	157	159
28	145	151
29	215	226
30	219	227
31	71	52
32	133	147
33	121	121
34	45*	32
35	45*	27
36	87	88
37	124	128
38	86	93
39	45*	48
40	73	65
41	45*	49
42	69	67
43	192	194
44	74	76
45	43*	46
46	43*	11
47	155	143
48	42*	52
49	61	73
50	119	116
51	40*	34

H,4,5

0	184	169
1	395	402
2	227	224
3	99	100
4	63	56
5	79	84
6	219	220
7	41*	69
8	85	84
9	247	243
10	77	56
11	85	84
12	42*	31
13	170	175
14	130	137
15	252	250
16	69	56
17	119	99
18	100	92
19	98	110
20	88	82
21	117	98
22	118	114
23	167	153
24	158	152
25	236	225
26	46*	17
27	127	123
28	125	150
29	259	267
30	110	122
31	142	102
32	101	97
33	147	145
34	73	76
36	96	117
37	96	102
38	45*	25
39	112	87
40	45*	37
41	113	128
42	73	52
43	67	54
44	76	81
45	88	85
46	42*	19
47	80	72
48	41*	72
49	40*	38

H,5,5

0	469	455
1	163	156
2	151	149
3	79	73
4	280	279
5	42*	26
6	184	176
7	98	100
8	260	257
9	76	79
10	108	103
11	265	255
12	43*	29
13	249	248
14	150	151
15	100	88
16	44*	45
17	104	88
18	103	132
19	121	112
20	45*	65
21	96	114
22	72	73
23	238	230
24	67	63
25	46*	59
26	155	159
27	249	259
28	173	159
29	46*	50
30	108	110
31	92	100
32	82	60
33	46*	61

H.5.5

34	46*	47
35	45*	45
36	45*	34
37	44*	27
38	45*	60
39	44*	47
40	44*	70
41	44*	44
42	84	81
43	95	96
44	67	42
45	41*	25
46	41*	24
47	75	53
48	116	110

H.6.5

0	121	121
1	182	176
2	180	173
3	203	207
4	70	81
5	198	205
6	43*	29
7	230	220
8	163	169
9	148	145
10	135	148
11	244	235
12	141	156
13	44*	48
14	105	121
15	98	97
16	197	192
17	89	85
18	131	159
19	120	126
20	86	105
21	82	68
22	80	87
23	137	139
24	139	135
25	121	135
26	93	69
27	47*	65
28	149	153
29	47*	49
30	98	104
31	46*	49
32	80	72
33	97	109
34	45*	50
35	75	87
36	107	91
37	123	118
38	44*	46
39	88	101
40	43*	16
41	102	104
42	42*	35
43	88	96
44	59	62
45	41*	68
46	120	116

H.7.5

0	318	337
1	204	209
2	45*	68
3	45*	11
4	138	140
5	148	164
6	78	67
7	77	68
8	48*	10
9	49*	69
10	80	68
11	138	126
12	78	60
13	98	65
14	75	70
15	147	143
16	151	119
17	122	121
18	108	117
19	119	99
20	91	86
21	177	183
22	155	162
23	116	116
24	150	141
25	233	217
26	148	147
27	51*	72
28	167	168
29	130	124
30	50*	48
31	49*	39
32	171	153
33	80	86
34	156	132
35	48*	9
36	147	140
37	100	117
38	56*	60
39	82	45
40	45*	34
41	45*	46
42	44*	5
43	80	49

H.8.5

0	207	193
1	70	25
2	152	134
3	184	173
4	187	180
5	49*	41
6	206	185
7	128	112
8	235	214
9	207	202
10	153	153
11	159	153
12	109	112
13	129	129
14	49*	75
15	81	76
16	118	115
17	109	122
18	50*	82
19	156	141
20	157	139
21	75	57
22	48*	29
23	193	195
24	176	186
25	48*	21
26	48*	61
27	48*	15
28	48*	56
29	49*	66
30	95	88
31	66	46

H.8.5

32	45*	26
33	135	110
34	83	72
35	96	83
36	61	38
37	42*	36
38	41*	15
39	41*	58
40	62	51

H.9.5

0	112	107
1	108	58
2	105	95
3	165	160
4	48*	52
5	75	83
6	163	147
7	225	237
8	48*	38
9	148	130
10	106	105
11	171	168
12	84	70
13	48*	53
14	75	79
15	48*	38
16	48*	16
17	131	134
18	48*	34
19	48*	27
20	129	128
21	239	234
22	131	120
23	111	103
24	70	84
25	120	109
26	47*	54
27	47*	26
28	65	51
29	69	59
30	91	79
31	44*	37
32	44*	14
33	44*	59
34	43*	29
35	43*	45
36	60	59

H.10.5

0	48*	23
1	73	83
2	47*	47
3	144	148
4	48*	54
5	89	68
6	47*	49
7	93	50
8	88	101
9	79	98
10	48*	64
11	47*	47
12	90	85
13	47*	41
14	120	117
15	88	95
16	106	78
17	47*	27
18	113	110
19	123	118
20	104	85
21	46*	31
22	110	93
23	46*	48
24	109	103
25	46*	47
26	45*	38
27	44*	4
28	44*	44
29	43*	19
30	43*	28

H.0.6

0	260	253
1	162	168
2	45*	22
3	372	382
4	155	153
5	176	194
6	287	291
7	232	209
8	315	316
9	162	169
10	197	197
11	326	341
12	279	277
13	45*	11
14	281	261
15	67	69
16	124	138
17	68	91
18	46*	37
19	126	125
20	187	184
21	47*	6
22	48*	61
23	177	177
24	107	114
25	69	75
26	119	130
27	82	79
28	49*	62
29	196	204
30	119	109
31	79	85
32	151	155
33	202	188
34	163	150
35	49*	21
36	155	144
37	201	198
38	85	68
39	48*	48
40	47*	16
41	47*	30
42	84	89
43	46*	39
44	55*	24
45	73	81
46	44*	14
47	85	58
48	43*	46
49	43*	3

H.1.6

0	227	235
1	118	127
2	269	268
3	370	361
4	132	129
5	201	196
6	267	264
7	315	311

H.1.6

8	132	124
9	178	184
10	140	129
11	217	208
12	156	138
13	455	462
14	86	93
15	83	86
16	172	160
17	123	136
18	75	66
19	85	84
20	199	203
21	151	163
22	104	102
23	103	97
24	117	109
25	100	94
26	130	130
27	76	78
28	154	166
29	256	261
30	188	190
31	99	104
32	49*	74
33	49*	57
34	108	115
35	186	192
36	139	141
37	49*	45
38	164	157
39	130	131
40	48*	53
41	47*	41
42	47*	30
43	46*	29
44	70	70
45	45*	13
46	44*	26
47	44*	67
48	43*	13
49	43*	14

H.2.6

0	331	332
1	316	317
2	181	174
3	146	131
4	75	56
5	182	183
6	265	268
7	266	260
8	90	82
9	272	273
10	181	185
11	158	164
12	147	156
13	280	281
14	47*	50
15	350	344
16	47*	52
17	142	147
18	171	141
19	131	115
20	73	72
21	142	136
22	48*	38
23	267	254
24	134	128
25	131	136
26	190	195
27	180	186
28	137	128
29	49*	59
30	93	92
31	166	151
32	139	127
33	74	86
34	87	83
35	81	63
36	49*	50
37	170	160
38	157	166
39	48*	51
40	48*	87
41	116	112
42	80	77
43	88	85
44	65	43
45	67	71
46	45*	34
47	44*	35
48	43*	12

H.3.6

0	165	158
1	138	140
2	112	115
3	389	381
4	100	106
5	110	123
6	67	45
7	134	140
8	99	109
9	301	285
10	85	98
11	144	135
12	202	203
13	239	238
14	132	125
15	48*	63
16	146	137
17	166	157
18	49*	82
19	70	73
20	145	144
21	49*	18
22	161	159
23	86	83
24	49*	42
25	49*	51
26	99	88
27	91	81
28	137	156
29	141	152
30	156	154
31	100	86
32	80	94
33	87	84
34	122	115
35	240	249
36	216	210
37	48*	64
38	49*	31
39	48*	29
40	84	69
41	99	110
42	47*	23
43	65	38
44	44*	45
45	44*	33
46	43*	10
47	43*	47

H.4.6

1	68	76
2	84	68
3	239	254
4	45*	74
5	110	95
6	177	169
7	144	149
8	105	108
9	144	126
10	267	269
11	180	167
12	97	105
13	205	230
14	151	158
15	148	143
16	47*	21
17	132	148
18	147	151
19	48*	15
20	96	91
21	48*	70
22	75	85
23	174	165
24	160	141
25	49*	35
26	101	94
27	49*	53
28	165	165
29	144	132
30	105	90
31	49*	36
32	153	143
33	116	111
34	49*	43
35	48*	46
36	75	79
37	48*	37
38	78	74
39	47*	24
40	79	92
41	46*	29
42	141	144
43	45*	25
44	45*	32
45	88	59
46	43*	14

H.5.6

0	47*	43
1	173	152
2	152	149
3	269	273
4	47*	66
5	332	332
6	48*	84
7	128	132
8	47*	48
9	47*	35
10	47*	32
11	358	358
12	98	66
13	47*	13
14	48*	14
15	206	193
16	258	252
17	121	122
18	197	199
19	192	185
20	80	41
21	206	192
22	48*	46
23	98	115
24	79	31
25	153	158
26	197	184
27	49*	38
28	49*	9
29	101	111
30	48*	15
31	91	68
32	48*	66
33	86	67
34	47*	8
35	47*	44
36	94	84
37	46*	16
38	89	65
39	80	63
40	45*	65
41	44*	59
42	44*	26
43	61	40
44	43*	62

H.6.6

0	48*	67
1	106	125
2	127	110
3	119	116
4	168	154
5	158	154
6	254	262
7	48*	63
8	167	158
9	141	127
10	193	190
11	176	168
12	125	123
13	162	165
14	48*	54
15	101	116
16	201	194
17	130	130
18	231	204
19	240	233
20	186	179
21	180	183
22	126	121
23	164	161
24	114	112
25	50*	27
26	50*	55
27	74	45
28	181	173
29	74	69
30	49*	37
31	135	119
32	48*	51
33	81	64
34	98	80
35	46*	37
36	65	69
37	75	61
38	45*	14
39	44*	20
40	56*	15
41	44*	60
42	64	43

H.7.6

0	125	113
1	82	71
2	141	132
3	159	171

H,7,6

4	77	40
5	88	70
6	49*	58
7	120	131
7	166	131
9	109	118
10	48*	2
11	48*	35
12	153	141
13	106	82
14	48*	20
15	122	93
16	238	228
17	49*	53
18	49*	65
19	49*	47
20	180	164
21	136	133
22	103	77
23	98	89
24	103	90
25	72	80
26	70	64
27	49*	35
28	48*	45
29	48*	61
30	123	126
31	91	84
32	131	121
33	81	63
34	45*	39
35	45*	44
36	102	95
37	44*	27
38	43*	24
39	43*	36

H,8,6

0	48*	47
1	104	101
2	72	101
3	76	95
4	128	132
5	113	117
6	48*	32
7	77	79
8	82	85
9	48*	29
10	175	152
11	130	111
12	49*	53
13	88	88
14	49*	71
15	49*	37
16	101	111
17	84	82
18	98	94
19	49*	60
20	121	123
21	175	176
22	49*	67
23	155	143
24	89	58
25	48*	26
26	83	75
27	137	122
28	80	67
29	47*	56
30	98	83
31	91	76
32	45*	41
33	73	77
34	81	40
35	70	61

H,9,6

0	48*	35
1	96	108
2	48*	28
3	99	86
4	49*	77
5	112	103
6	48*	19
7	86	59
8	48*	57
9	49*	56
10	48*	13
11	119	103
12	48*	42
13	48*	37
14	48*	57
15	48*	35
16	71	38
17	113	95
18	48*	24
19	104	114
20	73	61
21	95	98
22	88	80
23	47*	48
24	120	112
25	46*	34
26	45*	42
27	86	94
28	66	91
29	115	128
30	44*	63

H,10,6

0	47*	24
1	46*	46
2	46*	21
3	91	76
4	46*	34
5	45*	11
6	46*	18
7	46*	29
8	45*	27
9	45*	15
10	45*	42
11	45*	21
12	117	94
13	45*	42
14	45*	11
15	66	58
16	45*	33
17	45*	50
18	45*	29
19	45*	44
20	45*	20
21	44*	23
22	126	120
23	45*	34
24	110	97

H,0,7

1	118	125
2	213	206
3	222	211
4	418	425
5	405	433
6	421	420
7	126	116

H,0,7

8	255	251
9	288	311
10	162	160
11	139	132
12	217	201
13	102	78
14	216	211
15	111	118
16	294	280
17	49*	17
18	49*	84
19	49*	16
20	48*	36
21	128	120
22	114	130
23	76	67
24	49*	60
25	84	76
26	91	71
27	49*	28
28	49*	26
29	201	214
30	49*	47
31	84	86
32	49*	22
33	49*	67
34	99	66
35	135	127
36	48*	47
37	118	109
38	47*	13
39	47*	18
40	46*	30
41	46*	31
42	100	94
43	45*	28
44	44*	40

H,1,7

0	358	349
1	347	349
2	47*	47
3	333	346
4	132	135
5	206	208
6	348	344
7	531	540
8	97	85
9	76	81
10	257	256
11	107	95
12	167	155
13	308	303
14	180	176
15	287	284
16	247	254
17	81	115
18	186	201
19	49*	70
20	49*	62
21	99	109
22	138	148
23	178	174
24	80	76
25	127	133
26	89	81
27	192	198
28	49*	17
29	191	191
30	190	192
31	95	113
32	49*	89
33	75	68
34	48*	65
35	85	81
36	48*	31
37	48*	93
38	47*	89
39	46*	41
40	46*	32
41	45*	27
42	45*	17
43	45*	48
44	90	72

H,2,7

0	92	106
1	341	338
2	157	161
3	267	272
4	231	220
5	77	75
6	191	174
7	145	153
9	298	296
10	186	189
11	128	130
12	287	310
13	225	232
14	79	78
15	108	94
16	49*	61
17	100	97
18	103	114
19	50*	64
20	230	224
21	183	169
22	82	91
23	73	42
24	133	135
25	51*	94
26	50*	46
27	50*	54
28	162	158
29	130	126
30	50*	59
31	97	77
32	160	151
33	82	67
34	49*	75
35	119	123
36	183	176
37	72	38
38	47*	25
39	47*	47
40	46*	1
41	83	67
42	45*	40
43	45*	11
44	45*	42

H,3,7

0	86	71
1	275	280
2	143	137
3	144	138
4	144	129
5	182	176
6	230	233
7	85	95
8	168	192
9	126	102
10	172	165
11	161	163

H,3,7

12	238	261
13	203	203
14	90	107
15	107	81
16	188	204
17	115	118
18	167	169
19	118	129
20	129	125
21	120	121
22	50*	34
23	107	96
24	49*	18
25	49*	75
26	50*	77
27	50*	71
28	124	119
29	50*	71
30	183	168
31	48*	49
32	127	135
33	94	71
34	132	110
35	47*	54
36	47*	49
37	90	89
38	76	90
39	89	103
40	45*	33
41	44*	15
42	80	88

H,4,7

0	140	138
1	137	138
2	129	127
3	71	46
4	211	213
5	48*	50
6	49*	76
7	82	61
8	117	120
9	106	116
10	282	298
11	211	193
12	121	122
13	84	61
14	151	157
15	185	181
16	116	115
17	102	78
18	50*	74
19	49*	23
20	193	205
21	50*	15
22	83	72
23	106	108
24	51*	65
25	117	130
26	50*	52
27	95	80
28	88	92
29	48*	14
30	76	101
31	48*	13
32	126	116
33	47*	52
34	84	64
35	70	73
37	80	71
38	45*	8
39	45*	36
40	45*	50
41	140	124

H,5,7

0	48*	40
1	68	46
2	84	102
3	210	211
4	91	86
5	73	70
6	145	146
7	113	86
8	49*	67
9	128	139
10	168	159
11	111	123
12	49*	36
13	220	218
14	158	155
15	49*	35
16	50*	44
17	49*	45
18	50*	71
19	50*	85
20	50*	68
21	77	86
22	106	102
23	50*	59
24	50*	44
25	50*	44
26	114	115
27	49*	7
28	49*	46
29	48*	50
30	48*	24
31	71	30
32	48*	33
33	68	56
34	73	71
35	74	22
36	45*	23
37	45*	43
38	64	39
39	44*	38

H,6,7

0	76	92
1	49*	51
2	134	124
3	95	68
4	49*	32
5	97	108
6	168	177
7	101	99
8	49*	57
9	49*	75
10	104	85
11	50*	43
12	49*	48
13	130	98
14	132	143
15	256	254
16	132	128
17	118	116
18	119	112
19	175	175
20	50*	36
21	84	78
22	87	77
23	126	113
24	49*	12
25	50*	54

H,6,7

26	103	111
27	69	28
28	95	77
29	48*	7
30	75	63
31	47*	25
32	111	101
33	46*	29
34	46*	59
35	45*	59
31	46*	25
32	128	101
33	46*	29
34	46*	59
35	82	59
36	106	108

H,7,7

0	49*	57
1	88	95
2	49*	64
3	74	67
4	49*	59
5	190	186
6	49*	63
7	123	134
8	75	64
9	96	99
10	49*	54
11	87	80
12	89	99
13	83	103
14	108	102
15	87	95
16	171	164
17	128	127
18	159	159
19	116	94
20	49*	36
21	188	185
22	78	72
23	48*	50
24	48*	27
25	82	70
26	47*	31
27	47*	38
28	78	90
29	46*	29
30	111	101
31	112	107
32	64	52
33	134	115

H,8,7

0	100	102
1	48*	53
2	48*	45
3	91	84
4	99	99
5	98	84
6	48*	45
7	48*	20
8	48*	35
9	48*	35
10	48*	39
11	48*	50
12	150	154
13	48*	37
14	79	88
15	48*	70
16	48*	23
17	48*	10
18	48*	50
19	137	152
20	88	78
21	48*	53
22	47*	24
23	117	99
24	47*	63
25	47*	36
26	87	80
27	46*	45
28	73	72
29	98	93

H,9,7

0	139	159
1	47*	52
2	47*	60
3	47*	40
4	104	107
5	81	69
6	78	54
7	47*	58
8	47*	64
9	47*	43
10	113	93
11	47*	46
12	47*	46
13	75	55
14	46*	33
15	76	74
16	96	87
17	46*	28
18	46*	41
19	74	58
20	77	58
21	46*	57
22	69	51
23	83	66

H,10,7

0	112	97
1	46*	64
2	76	88
3	46*	62
4	45*	3
5	45*	51
6	88	94
7	46*	44
8	71	81
9	46*	49
10	45*	27
11	45*	33
12	45*	29
13	45*	31
14	45*	9

Tabelle B 7; Liste der Bijvoet-Reflexe des Tridentochinons

H	K	L	QTH	QEX	SQEX			
14	1	1	1.0087	.9981	.0091	-	I	W
15	1	1	.9443	.9674	.0363	+	I	W
2	2	1	.9531	.9411	.0044	+		
27	3	1	.9538	.9651	.0272	+		
4	4	1	1.0033	.9582	.0060	-		
8	4	1	.9385	.9358	.0102	+		
3	5	1	.9522	.9479	.0057	+		
8	5	1	.9444	.9712	.0085	+		
18	5	1	1.0214	.9737	.0179	-		
23	5	1	.9750	.9701	.0272	+		
3	6	1	1.1500	1.1233	.1270	+	I	
9	6	1	.9220	.9550	.0287	+		
1	7	1	.9599	.9870	.0127	+		W
8	7	1	1.0187	.9566	.0562	-	I	
9	8	1	.9415	.9694	.0337	+	I	
13	8	1	.9303	.9706	.0106	+		
17	9	1	.9616	.9873	.0169	+	I	
8	16	1	.9725	1.0706	.0633	-		
3	1	2	.9124	.9297	.0121	+		
9	1	2	.9621	.9788	.0014	+		
11	1	2	.9416	.9327	.0240	+		
14	1	2	.9064	.9962	.0385	+	I	W
5	2	2	.9393	.9507	.0014	+		
8	3	2	.9475	.9661	.0032	+		
17	3	2	.9516	.9967	.0127	+	I	W
5	4	2	.8822	.9562	.0190	+		
6	4	2	.9997	.9791	.0051	+		
8	4	2	.9248	.9431	.0032	+		
13	4	2	.9529	.9941	.0046	+		W
4	6	2	.9325	.9740	.0125	+		
8	6	2	.9310	.9437	.0063	+		
11	8	2	.9539	.9653	.0140	+		
22	9	2	.9569	1.0049	.0203	-	I	W
17	1	3	.9611	.9840	.0103	+		
3	3	3	.9567	.9627	.0052	+		
3	4	3	1.0050	.9725	.0031	-		
1	5	3	1.0506	1.0277	.0101	+		
11	5	3	.9437	.9602	.0038	+		
15	5	3	.9372	.9626	.0105	+		
2	6	3	.9765	.9902	.0025	+		
9	7	3	.9134	.9490	.0226	+		
3	8	3	.9448	.9740	.0119	+		
8	8	3	1.0087	1.0154	.0115	+		
1	9	3	.9348	.9479	.0364	+		
7	9	3	.9124	.9679	.0263	+		W
2	1	4	.9351	.9534	.0012	+		
3	1	4	.9392	.9515	.0032	+		
7	1	4	.9443	.9766	.0035	+		
10	1	4	.9398	.9716	.0060	+		
5	2	4	.8854	.9323	.0065	+		
6	2	4	.8250	.9423	.0508	+		

8	2	4	.9464	.9687	.0040	+		
4	3	4	.9445	.9818	.0049	+		
7	3	4	1.0119	.9877	.0154	-	I	
8	3	4	.9333	.9673	.0059	+		
12	3	4	.9457	.9515	.0065	+		
17	3	4	1.0394	1.0112	.0173	+	I	
20	3	4	.9678	.9719	.0110	+		
5	4	4	1.0042	.9757	.0042	-		
6	4	4	.9451	.9509	.0033	+		
7	4	4	.9088	.9471	.0055	+		
10	4	4	.9461	.9736	.0029	+		
4	5	4	.9497	.9586	.0047	+		
3	6	4	.9429	.9835	.0080	+		
8	9	4	.9511	.9891	.0128	+	I	W
9	16	4	1.0344	1.0173	.0275	+	I	
6	1	5	.9497	.9816	.0030	+		
7	1	5	.9527	.9861	.0023	+		
15	1	5	.9659	.9661	.0161	+		
6	3	5	.9404	.9444	.0036	+		
11	3	5	.9997	.9998	.0164	+	I	W
17	3	5	.9441	.9466	.0198	+		
18	3	5	.9537	.9688	.0160	+		
5	4	5	.9447	.9440	.0045	+		
3	5	5	.9548	.9672	.0044	+		
9	5	5	.9479	.9572	.0106	+		
11	5	5	.9461	.9862	.0106	+		
16	5	5	.9417	.9729	.0162	+		
18	5	5	.9451	.9476	.0355	+		W
10	6	5	.9987	1.0016	.0103	-	I	
1	7	5	1.0323	1.0169	.0137	+		
11	7	5	.8644	.9183	.0689	+		
2	8	5	1.0430	1.0283	.0262	+		
8	8	5	.9457	.9607	.0220	+		
16	1	6	1.0493	1.0412	.0431	+	I	
8	2	6	.9240	.9502	.0143	+		
12	2	6	.9340	.9582	.0169	+		
16	2	6	.9498	.9386	.0131	+		
7	3	6	.9419	.9617	.0045	+		
10	3	6	.9413	.9807	.0056	+		
8	4	6	.9462	.9694	.0056	+		
9	4	6	1.0210	1.0136	.0122	+		W
11	4	6	.9405	.9577	.0093	+		
12	4	6	.9973	.9629	.0157	+		
11	5	6	.9177	.9361	.0169	+		
14	5	6	.9559	.9648	.0129	+		
15	5	6	1.0212	1.0119	.0262	+	I	W
17	5	6	1.0272	.9517	.0299	-		
3	6	6	.9458	.9756	.0283	+	I	W
8	6	6	.9537	.9772	.0068	+		
1	7	6	.9466	.9852	.0079	+		
6	7	6	.9373	.9743	.0168	+		W

7	7	6	.1021	.9733	.0205	+		
1	8	6	.9567	.9549	.0298	+		
4	8	6	.9438	.9788	.0081	+		
7	8	6	.9521	.9531	.0115	+		
10	8	6	.9529	.9706	.0100	+		
6	9	6	.9479	.9913	.0210	+	I	
3	1	7	1.0041	1.0063	.0243	+	I	W
22	1	7	.9777	.9786	.0165	+		W
1	2	7	.9043	.9424	.0194	+		
2	2	7	1.0108	.9826	.0109	-		
5	2	7	.9279	.9306	.0157	+		
6	2	7	.9346	.9397	.0156	+		
11	2	7	.9357	.9644	.0111	+		
12	2	7	1.0207	.9692	.0212	-		
3	3	7	.9278	.9404	.0078	+		
13	3	7	1.0233	.9827	.0220	-	I	W
15	3	7	.9453	.9441	.0194	+		
3	4	7	1.0168	.9883	.0121	-	I	W
9	4	7	.9215	.9579	.0090	+		
11	4	7	1.0000	.9919	.0152	+	I	
14	4	7	.9595	.9709	.0088	+		
15	6	7	1.0386	1.0169	.0289	+	I	
1	7	7	1.0522	1.0273	.0226	+		
8	7	7	.9469	.9946	.0133	+	I	W
11	1	8	1.0084	.9795	.0104	-		W
14	1	8	1.0538	1.0486	.0583	+	I	W
15	1	8	1.0290	1.0219	.0268	+	I	
4	3	8	.9423	.9626	.0146	+		
6	3	8	.9398	.9433	.0097	+		
8	3	8	.9339	.9664	.0073	+		
11	3	8	.9484	.9731	.0161	+		
15	3	8	1.0224	.9990	.0169	-	I	W
4	4	8	.9495	.9576	.0075	+		
10	4	8	1.0102	.9960	.0288	-	I	W
11	4	8	.9441	.9693	.0101	+		
7	6	8	.9525	.9659	.0087	+		
12	7	8	.9461	.9882	.0203	+	I	
13	9	8	.9377	.9928	.0208	+	I	W
9	2	9	.9415	.9749	.0149	+		
12	3	9	1.0040	1.0175	.0140	+		
14	3	9	.9644	.9657	.0096	+		
2	4	9	.9427	.9591	.0139	+		

Tabelle B 8: Liste der Bijvoet-Reflexe des Secotridentochinon

H	K	L	QTH	QEX	SQEX			
2	1	1	.9768	.9896	.0028	+		
4	1	1	.9741	.9848	.0049	+		
15	1	1	.9787	.9806	.0102	+		
10	2	1	1.0861	1.0643	.0722	+	I	
41	2	1	1.0453	.9274	.2755	-	I	W
46	2	1	.9713	.9934	.0157	+	I	W
52	2	1	.9665	.9983	.0143	+	I	W
14	3	1	.9622	1.0048	.0130	-	I	W
28	3	1	.9697	.9998	.0107	+	I	W
42	3	1	.9533	.9905	.0162	+	I	W
55	3	1	1.0582	1.0395	.0219	+		
9	4	1	.9589	.9798	.0208	+	I	
12	4	1	.9603	2.9248	.0698	-		W
26	4	1	1.0520	1.0099	.0099	+	I	
4	5	1	1.0475	1.0245	.0093	+		
30	5	1	1.0890	1.0047	.0097	+	I	
30	6	1	1.0695	.9919	.0111	-	I	
35	1	2	.9524	.9856	.0096	+		W
50	1	2	.9564	1.0226	.0118	-		W
11	2	2	1.0306	.9888	.0071	-		W
42	2	2	.9682	1.0017	.0149	-	I	W
16	3	2	1.0309	.9940	.0076	-	I	W
28	3	2	.9434	.9884	.0107	+		W
29	3	2	1.0648	1.0058	.0085	+	I	W
35	3	2	.9556	.9927	.0104	+	I	W
28	4	2	1.0460	.9851	.0093	-		
12	5	2	1.0336	.9979	.0075	-	I	W
16	5	2	.9689	.9959	.0065	+	I	W
2	6	2	1.0348	.9974	.0098	-	I	W
24	6	2	.9496	.9724	.0096	+		
25	6	2	.9208	.9975	.0106	+	I	W
5	7	2	1.0465	1.0173	.0084	+		
39	7	2	1.0431	.9900	.0099	-		W
40	7	2	.9615	1.0059	.0100	-	I	W
22	1	3	1.0430	1.0076	.0095	+	I	W
28	1	3	1.0352	1.0014	.0089	+	I	W
49	1	3	1.0499	.9944	.0127	-	I	W
7	2	3	1.0540	1.0051	.0067	+	I	
51	2	3	1.0368	.9883	.0085	-		W
44	5	3	.9524	.9899	.0109	+	I	W
15	6	3	.9632	.9918	.0048	+	I	W

24	6	3	1.0417	.9982	.0111	-	I	W
37	7	3	.9585	.9965	.0092	+	I	W
1	8	3	1.0335	1.3203	.0254	+		W
35	8	3	.9484	.9980	.0103	+	I	W
17	9	3	.9631	.9831	.0115	+		
35	9	3	.9629	.9877	.0083	+		W
36	9	3	.9555	1.0103	.0075	-		W
3	10	3	1.0369	.9958	.0103	-	I	W
26	1	4	.9901	.9890	.0091	+		W
16	2	4	1.0245	1.0075	.0052	+		W
24	2	4	.9101	.8620	.0075	+		W
22	3	4	.9598	.9885	.0091	+		
14	4	4	1.0441	.9836	.0081	-		
18	6	4	1.0503	1.0110	.0101	+		
10	8	4	.9146	1.0027	.0122	-	I	W
24	8	4	.9643	.9971	.0110	+	I	
2	1	5	.9331	1.0009	.0068	-	I	W
13	1	5	.9684	.9875	.0124	+		W
9	2	5	1.0346	1.0395	.0113	+		
26	2	5	.9235	.9864	.0107	+		W
40	2	5	1.0417	.9971	.0099	-	I	W
31	3	5	1.0554	1.0023	.0126	+	I	W
5	4	5	.9286	.9967	.0089	+	I	W
44	4	5	.9368	1.0034	.0075	-	I	W
3	5	5	.9414	.9994	.0101	+	I	W
32	5	5	.9634	.9759	.0126	+		W
32	6	5	.9550	.9860	.0099	+		W
1	9	5	1.0582	.9864	.0132	-		
19	1	6	1.0638	1.0356	.0090	+		W
23	1	6	.9442	1.0594	.0111	-		W
19	3	6	1.0463	1.0069	.0110	+	I	W
27	3	6	.9296	1.0369	.0120	-		W

LITERATURVERZEICHNIS

1. W. Steglich, Chemie in unserer Zeit 1975 (4), 117
2. R. Hosemann, S.N. Bagchi, Direct Analysis of Diffraction By Matter
   North-Holland Publisting Company, Amsterdam 1962
3. J. Karle, The Determination of Phase Angles in: Advances in Structure Research by Diffraction Methods, Vol I
   Interscience Publishers, New York-London 1969

3a. H. Hauptmann, J. Karle, Solution of the phase Problem I. The Centrosymmetric Crystal A.C.A. Monograph No. 3 New York: Polycrystal Book Service 1953

4. D. Sayre, Acta Cryst. 5, 60 (1952)
5. W. Cochran, M.M. Woolfson, Acta Cryst. (1955), 8, 1
6. E. Menzel, W. Mirande', I. Weingärtner, Fourier Optik und Holographie
   Springer Verlag Wien, New York 1973
7. H. Bradaczek, P. Luger, Skripte zur Vorlesung Mathematik II für Chemiker 1973
8. W. Cochran, Acta Cryst. (1955), 8, 473
9. H. Hauptmann, J. Karle, Acta Cryst. (1956), 9, 635
10. J. Karle, I.L. Karle, Acta Cryst. (1966), 21, 849
11. A.F. Peerdemann, A.J. van Bommel, J.M. Bijvoet (1951), Proc. Kononkl. Ned. Akad. Wetnschap 1354, 16

11a. nach: R. Srinivasan: Application of X-Ray Anomalous Scattering in Stractural Studies in Advances in Structure Research by Diffraction Methods, 4, F. Vieweg & Sohn, Braunschweig 1972

12. P. Luger, W. Dreissig, Programm zur Berechnung der Datenversorgung eines Siemens Diffraktometers unveröffentlicht
13. P. Luger, W. Dreissig, Programm zur Auswertung von Intensitätsmessungen nach der Fünfwertmethode unveröffentlicht

14. H. Englmeier, Dissertation T.H. München 1967
15. A.I. Kitaigorodsky, Molecular Crystals and Molecules, Academic Press, New York, London 1973
16. N.A. Ahmed, A.I. Kitaigorodsky, K.V. Mirshaya Acta Cryst. (1971), B27, 867
17. V.M. Coiro, P. Giacomello, E. Giglio Acta Cryst. (1971), B27, 2112
18. X-Ray System Version of June 1972, Technical Report TR-192, Univ. of Maryland 1972
19. M.D. Joesten, L.J. Schaad, Hydrogen Bonding M. Dekker, Inc, New York 1974
20. International Tables for X-Ray Crystallography The Kynock Press, Birmingham, England 1965
21. G.N. Ramachandran, V. Sasisekharan, Advan. Protein Chem. 23, 283 (1968) nach [15]
22. D.E. Williams, Acta Cryst. (1972), A28, 629
23. Casalone, C. Mariani, A. Magnoli, M. Simonetta (1968), Mol. Phys. 15, 339
24. Larson, Acta Cryst. (1967), 23, 664
25. P. Main, M.M. Woolfson, G. Germain (1971) MULTAN, A Computer Program for the Automatic Solution of Crystal Structures, Univ. of York Printing Unit, York, Version 1975
26. H. Besl, H.J. Hecht, P. Luger, V. Pasupathy, W. Steglich, Chem. Ber. (1975), 108, 3675
27. J. Silverman, I. Stam-Thole, C.H. Stam, Acta Cryst. B27, 1846 (1971)
28. N.P. Brandenburg, J. Appl. Cryst. 7, 401 (1974)
29. E.J. Valente, W.F. Trager, L.H. Jensen Acta Cryst. (1975) B31, 954
30. D.W. Engel, Dissertation, Univ. München 1971
31. L.F. Fieser, M. Fieser, Organische Chemie Verlag Chemie, Weinheim/Bergstr. 1968
32. P. Luger, Dissertation, Freie Universität Berlin 1970

33. W. Dreissig, Dissertation, Freie Universität Berlin 1969

34. G. Huttner, S. Schelle, Programm MOLPLOT Technische Univ. München 1971

Die vorliegende Arbeit wurde unter der Leitung von Herrn Prof. Dr. H. Bradaczek in der Zeit von Dezember 1973 bis März 1976 am Institut für Kristallographie der Freien Universität Berlin durchgeführt.

Herrn Prof. Dr. H. Bradaczek danke ich für die Stellung der Aufgabe und besonders für die mir in dieser Zeit stets gewährte Unterstützung.

Herrn Prof. Dr. W. Steglich sei gedankt für Anregungen zur Durchführung dieser Arbeit und die Überlassung der Substanzen.

Herrn Priv. Doz. Dr. P. Luger und Herrn Dipl. Chem. R. Reinhardt möchte ich danken für vielfältige Anregungen und Diskussionen.

Frau H. Bombosch und Frau U. Ahlers danke ich für ihre Hilfe bei der Anfertigung des Manuskriptes.

L E B E N S L A U F

Am 26.8.1947 wurde ich, Hans - Jürgen Hecht, als Sohn des Arztes Dr. Helmut Hecht und seiner Ehefrau Ingeborg, geb. Kissel, in Clausthal Zellerfeld geboren.

Von 1954 bis 1958 besuchte ich die Volksschule, zunächst in Hameln, ab 1955 in Goslar. Von dort wechselte ich 1958 auf das Ratsgymnasium Goslar, an dem ich im Herbst 1966 das Abitur ablegte. Im Wintersemester 1966 / 67 begann ich mit dem Studium der Chemie an der Freien Universität Berlin. Die Vordiplomprüfung legte ich hier im Frühjahr 1969 ab. Von Herbst 1971 bis April 1972 führte ich am Institut für Kristallographie unter Anleitung von Prof. Dr. K. Plieth meine Diplomarbeit durch, die Diplomprüfung bestand ich im Mai 1972.

Seit dem Herbst 197o bin ich am Institut für Kristallographie beschäftigt, zunächst bis Herbst 1972 als studentische Hilfskraft, ab April 1973 als wissenschaftlicher Assistent.

F. Höpfner - Dissertationsdruck - 1 Berlin 12 - Pestalozzistraße 106
Tel.: 3128885 - 3138198